

## 筑波大学計算科学研究センター 平成28年度 年次報告書

雑誌名	筑波大学計算科学研究センター 平成28年度 年次報告書
発行年	2017-09
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2241/00150226">http://hdl.handle.net/2241/00150226</a>

目次

まえがき .....	2
1 センター組織と構成員 .....	3
2 平成 28 年度の活動状況 .....	7
3 各研究部門の報告 .....	10
I. 素粒子物理研究部門 .....	10
II. 宇宙物理研究部門 .....	36
III. 原子核物理研究部門 .....	64
IV. 量子物性研究部門 .....	88
V. 生命科学研究部門 .....	106
V-1. 生命機能情報分野 .....	106
V-2. 分子進化分野 .....	122
VI. 地球環境研究部門 .....	140
VII. 高性能計算システム研究部門 .....	154
VIII. 計算情報学研究部門 .....	205
VIII-1. データ基盤分野 .....	205
VIII-2. 計算メディア分野 .....	227

## まえがき

筑波大学計算科学研究センターは、科学諸分野と計算機科学分野の協働・融合を軸とした「学際計算科学」を推進し、超高速計算機システムおよび超高速ネットワーク技術の開発を行うと共に、科学の諸領域における超高速シミュレーションおよび大規模データ解析や情報技術の革新的な応用方法の研究を行っています。現在、素粒子物理、宇宙物理、原子核物理、量子物性、生命科学、地球環境、高性能計算システム、計算情報学の 8 つの研究部門を有し、先進的な計算科学の研究を行っています。

本センターは、平成 4 年度に設置された計算物理学研究センターを前身とし、平成 16 年 4 月に改組拡充され発足しました。上記の研究を行う機関であると同時に、外部の研究者の利用に供する全国共同利用施設としての機能ももっており、学際共同利用プログラムの下で全国の研究者にセンター計算機資源を提供しています。さらに、「研究集会開催支援」、「研究者招聘支援」、「共同研究旅費支援」、「短期雇用支援」など、共同研究における研究者や学生の交流を図るための支援も行っています。平成 22 年には、文部科学省共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」に認定され、平成 27 年度に再認定を受け、2 期目がスタートしました。

平成 28 年度は、研究力強化の観点から、当センターは人事面、予算面で独立な部局となりました。また、東京大学情報基盤センターとの協定により設置された「最先端共同 HPC 基盤施設（JCAHPC: Joint Center of Advanced HPC）」においては、メニーコア型大規模スーパーコンピュータシステム Oakforest-PACS を導入しました。国内連携としては、「計算基礎科学連携拠点」におけるポスト京重点課題 9「宇宙の基本法則と進化の解明」の推進に加えて、ポスト「京」萌芽的課題も開始しました。国際連携としては、英国エジンバラ大学、米国ローレンスバークレー国立研究所との協定に基づくワークショップを開催しました。

本小冊子は、平成 28 年度の計算科学研究センターの活動内容をまとめたものです。ご高覧いただければ幸甚に存じます。

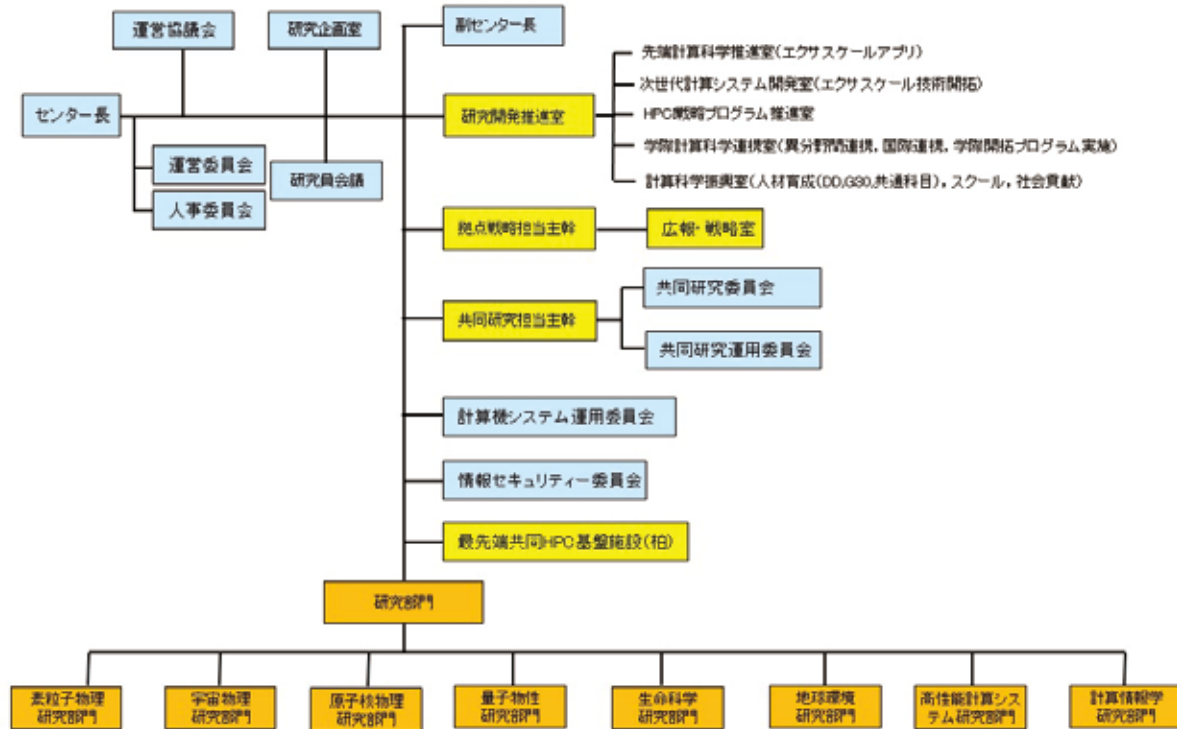
平成 29 年 7 月吉日

計算科学研究センター長

梅村 雅之

## 1 センター組織と構成員

### 計算科学研究センター組織図



### 組織人員・教員一覧リスト

センター長	梅村 雅之
副センター長	朴 泰祐
運営協議会	委員長 中村 宏 (東京大学)
運営委員会	委員長 梅村 雅之
人事委員会	委員長 梅村 雅之
研究企画室	委員長 梅村 雅之
研究員会議	議長 梅村 雅之
研究開発推進室	
・ 先端計算科学推進室	室長 矢花 一浩
・ 次世代計算システム開発室	室長 朴 泰祐
・ HPC 戦略プログラム推進室	室長 藏増 嘉伸
・ 学際計算科学連携室	室長 高橋 大介



- 計算科学振興室 室長 北川 博之
- 拠点戦略担当主幹 梅村 雅之
- 共同研究担当主幹 矢花 一浩
- 共同研究委員会 委員長 矢花 一浩
- 共同研究運用委員会 委員長 矢花 一浩
- 計算機システム運用委員会 委員長 朴 泰祐
- 情報セキュリティ委員会 委員長 梅村 雅之
- 最先端共同 HPC 基盤施設 施設長 中村 宏（東京大学） 副施設長 梅村 雅之

**研究部門** （共同研究員は学内のみ記載）

**素粒子物理研究部門**

- 教授 藏増 嘉伸（部門主任）
- 准教授 吉江 友照、石塚 成人、根村 英克、谷口 裕介
- 助教 大野 浩史
- 研究員 浮田 尚哉、滑川 裕介、佐々木 健志、齋藤 華、吉村 友佑、山下 巧
- 客員教授 青木 愼也（京都大学）
- 共同研究員 金谷 和至（教授）、山崎 剛（准教授）

**宇宙物理研究部門**

- 教授 梅村 雅之（部門主任）、相川 祐理
- 准教授 森 正夫
- 講師 吉川 耕司
- 助教 Wagner, Alexander、古家 健次
- 研究員 三木 洋平、田中 賢、道越 秀吾、高水 裕一、安部 牧人
- 客員准教授 中里 直人（会津大学）

**原子核物理研究部門**

- 教授 中務 孝（部門主任）、矢花 一浩
- 講師 橋本 幸男
- 助教 日野原 伸生
- 研究員 鷲山 広平、野村 昂亮、Guillaume Scamps、温 凱

**量子物性研究部門**

- 教授 矢花 一浩（部門主任）

准教授	小泉 裕康、全 暁民、小野 倫也
講師	前島 展也
研究員	植本 光治、佐藤 駿丞
客員教授	押山 淳（東京大学）
共同研究員	日野 健一（教授）、岡田 晋（教授）

## 生命科学研究部門

### 生命機能情報分野

教授	重田 育照（部門主任）
助教	庄司 光男、栢沼 愛
研究員	佐藤 竜馬、原田 隆平、鬼頭(西岡) 宏任、Bui Thi Kieu My
共同研究員	広川 貴次（教授）

### 分子進化分野

教授	稲垣 祐司（分野リーダー）
研究員	中山 卓郎
共同研究員	橋本 哲男（教授）
特任助教	湯山 育子（生命環境系）

## 地球環境研究部門

教授	田中 博（部門主任）、日下 博幸
助教	松枝 未遠
研究員	木村 富士男、池田 亮作、Doan Quang Van、山上 晃央
共同研究員	植田 宏昭（教授）

## 高性能計算システム研究部門

教授	朴 泰祐（部門主任）、高橋 大介、建部 修見
准教授	川島 英之
助教	多田野 寛人、小林 諒平
研究員	田中 昌宏、Mohamed Amin Jabri、藤田 典久
客員准教授	塙 敏博（東京大学）
共同研究員	安永 守利（教授）、和田 耕一（教授）、櫻井 鉄也（教授）、 山口 佳樹（准教授）、今倉 暁（助教）

## 計算情報学研究部門

### データ基盤分野

教授	北川 博之（部門主任）
准教授	天笠 俊之
助教	塩川 浩昭
研究員	Salman Ahmed Shaikh、駒水 孝裕

### 計算メディア分野

教授	亀田 能成（分野リーダー）
准教授	北原 格
共同研究員	白川 友紀（特命教授）

## 2 平成 28 年度の活動状況

### 2.1 平成 28 年度の活動方針

計算機システムの開発・運用，並びにこれを用いた学際計算科学の研究を推進する。「最先端共同 HPC 基盤施設」においては，東京大学との協働により新たなスーパーコンピュータを導入し，幅広い分野の学術研究に供し，計算科学の発展に資する。また，「計算基礎科学連携拠点」，「宇宙生命計算科学連携拠点」を中心に，異分野間連携を強化し，国際共同研究拠点化に向けた研究体制の構築を図る。また，センターの本格的な部局化を踏まえ，機能強化に向けた取り組みを実施する。

### 2.2 学際共同利用プログラムの取組と成果

学際共同利用プログラムにより，素粒子分野，宇宙分野，原子核分野，物質科学分野，生命分野，地球環境分野，生物分野，化学分野，超高速計算システム分野，計算情報学分野，数値解析分野で，計 62 課題の研究プロジェクトを採択し共同研究を実施した。重点課題についても，学際共同利用プログラムのプロジェクトとして実施した。これらの共同研究により，学術論文 179 件を発表した。10 月には，第 8 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出シンポジウムー発展する計算科学と次世代の計算機ー」を開催し，様々な分野における計算科学の発展と次世代の計算機開発の展望を議論した。

### 2.3 最先端共同 HPC 基盤施設と Oakforest-PACS

東京大学情報基盤センターと共同設置した「最先端共同 HPC 基盤施設」において，新たなメニーコア型大規模スーパーコンピュータシステム Oakforest-PACS を導入し，国内最高性能となる総ピーク演算性能 25PFLOPS を達成し，Top500 ランキングで世界第 6 位（国内第 1 位），HPCG ランキングで世界第 3 位を獲得した。12 月には，全システム



の運用を開始した。Oakforest-PACS は，ネットワーク型の共同利用・共同研究拠点である東京大学情報基盤センターと，単独型の拠点である筑波大学計算科学研究センターが共同運

用するスーパーコンピュータであり、全国で初めての事業である。このスケールメリットにより、計算科学の幅広いユーザに最先端の計算機資源を提供することが可能となった。

## 2.4 筑波山神社・筑波大学計算科学研究センター共同気象観測所

筑波大学計算科学研究センターは、関東平野の孤立峰である筑波山の男体山（標高 871m）山頂にて 2012 年（平成 24 年）より気象観測を行ってきた。継続的に気象データを記録・公開することにより、筑波山山頂で 1902 年（明治 35 年）から 100 年以上に亘って続く気象データの蓄積と気象研究の発展を支えている。平成 28 年度に、気象観測施設の所有者である筑波山神社との合意に基づき、筑波山山頂における気象観測の継続性を確かなものとするため、観測所として「筑波山神社・筑波大学計算科学研究センター共同気象観測所」を設置した。

これにより、研究者にとっては関東の降雪予測や温暖化研究のための貴重なデータが継続して得られるようになった。観測データはリアルタイムに Web で公開しており、一般の方へ、筑波山山頂の気温や雨、風の状況などの情報提供が可能になった。

## 2.5 国内外の連携活動

国内連携として、「計算基礎科学連携拠点」を基盤に、ポスト「京」重点課題⑨「宇宙の基本法則と進化の解明」の代表機関として連携研究を推進した。また、ポスト「京」重点課題⑦「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」のサブ課題 A「高機能半導体デバイス」、ならびにサブ課題 B「光・電子融合デバイス」の協力機関として、研究を推進した。また、ポスト「京」萌芽的課題①「基礎科学のフロンティア極限への挑戦」として「基礎科学の挑戦－複合マルチスケール問題を通した極限の探求」が採択され、サブ課題 D「量子力学の基礎と情報」を分担機関として推進した。ポスト「京」萌芽的課題③「太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明」では、「生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明」が採択され、「宇宙生命計算科学連携拠点」の下で、サブ課題 D「原始太陽系における物質進化と生命起源」を分担機関として推進した。

国際連携としては、5 月には、米国ローレンスバークレー国立研究所（LBNL）と、12 月にはエジンバラ大学（EPCC）と合同ワークショップを開催し、2 月には、韓国 KISTI において、HPC Winter School とワークショップを開催し、国際的な活動を進めた。

## 2.6 センターの部局化

研究力強化の観点から、平成 28 年度より部局化が成立した。部局化に当たっては、関係する系との間で、人事・予算等について基本方針について合意がなされた。12 月には、センター増築棟が竣工し、これまでセンター外に居室を持っていた教員全員の居室をセンターに移し、組織的にも物理的にも集中した研究体制の構築が実現した。教員の学群・研究科の担当

についてはこれまで通り行うこととした。各種委員会については、センターとして必要となる委員会を順次設置することとした。事務体制については、現行の規模を維持し、これにセンター雇用の人員を加えて強化することとした。

## 2.7 センターの機能強化

計算科学研究センターは、ミッションの再定義を、計算機工学として工学分野で、計算科学分野として理学分野で行った。計算科学研究センターは、科学諸分野と計算機科学分野の協働・融合を軸とした「学際計算科学」の推進をミッションとし、学際共同利用プログラムの実施、先進的な計算機技術に基づく新たな計算機の開発・製作、計算科学諸分野の融合、異分野間連携、国際連携の推進、人材育成のための教育プログラムの実施、スクール開催等を行っている。

また、筑波大学では、研究大学強化促進事業の下で、計算科学研究センターを先端的研究型重点研究センターとして位置付けており、これにより、全学戦略枠の人員配置やプロジェクト予算の配分等を通じて重点的な機能強化が行われ、当センターは平成 28 年度より本学の独立した部局の一つとなった。計算科学研究センターは、計算機科学分野と科学諸分野が融合・連携して「学際計算科学」を推進し、我が国の計算科学の発展に資する高性能計算機の開発・運用を行っている。筑波大学の理念は、国、機関、学内組織などの境界を超えた教育研究のトランスボーダー化の加速であり、計算科学研究センターの役割は、計算科学を通じた学際融合と国際化の加速である。学際計算科学は、計算機工学と科学諸分野の融合だけでなく、科学の異分野間融合の高い可能性をもつものであり、当センターでは「計算」を共通軸とした共同研究が多く行われている。センターが推進する「宇宙生命計算科学連携」および「計算基礎科学連携」は、分野の境界を越えたグローバルな研究展開を実践できる拠点であり、既に様々な異分野間共同研究が進んでいる。今後、センターのもつ学際性と人材育成によって、機能強化・特色化を加速し、国際的なハブ拠点へと発展させる。

### 3 各研究部門の報告

#### 1. 素粒子物理研究部門

##### 1. メンバー

教授	藏増 嘉伸、青木 慎也（客員研究員）、金谷 和至（共同研究員）
准教授	石塚 成人、谷口 裕介、吉江 友照、根村 英克、山崎 剛（共同研究員）
助教	大野 浩史（国際テニュアトラック）
研究員	浮田 尚哉、齋藤 華、佐々木 健志、滑川 裕介、山下 巧、吉村 友佑
学生	大学院生 8 名、学類生 5 名

##### 2. 概要

当部門では、計算科学研究センターと密接な連携のもと、格子 QCD の大型シミュレーション研究を推進している。当部門の研究者の大半が参加する主要プロジェクトであった HPCI 戦略プログラム分野 5 研究開発課題 1「格子 QCD による物理点でのバリオン間相互作用の決定」は、2015 年度で終了した。2016 年秋からは、JCAHPC（最先端共同 HPC 基盤施設：筑波大学と東京大学両機関の教職員が中心となり設計するスーパーコンピュータシステムを設置し、最先端の大規模高性能計算基盤を構築・運営するための組織）において Oakforest-PACS（略称「OFP」：ピーク演算性能 25PFLOPS の超並列クラスタ計算機、「京」を超える国内最高性能システム）が稼働を開始した。本年度は、筑波大学を中心とした PACS Collaboration を組織し、OFP を用いた新たなプロジェクト研究を開始した。これと並行して、有限温度・有限密度 QCD の研究、 $K \rightarrow \pi\pi$  崩壊におけるハドロン行列要素計算、テンソルネットワーク形式に基づく格子ゲージ理論の研究、標準理論を超える物理の探求など、活発な研究活動を行った。さらに、格子 QCD 配位やその他のデータを共有する為のデータグリッド ILDG/JLDG の構築・整備を推進した。

国内の計算科学全体の動向として、2015 年度で終了した HPCI 戦略プログラムの後継として、「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題」に関するアプリケーション開発・研究開発が始まっている。現在 9 つの重点課題が設定されており、9 番目の課題である「宇宙の基本法則と進化の解明」が素粒子物理・原子核物理・宇宙物理分野を対象とする基礎科学的研究課題である。その活動は、<http://www.jicfus.jp/jp> に詳しい。また、重点課題と並行して、2016 年度から 4 つの萌芽的課題が設定され、1 番目の課題である「基礎科学のフロンティア－極限への挑戦」は基礎科学における分野横断的な研究課題であり、当部門も分担機関として参加している。

#### 3. 研究成果

**【1】 PACS Collaboration による Oakforest-PACS を用いた大規模シミュレーション(蔵増、石塚、谷口、山崎、吉江、浮田、滑川)**

2016 年秋に JCAHPC において Oakforest-PACS (OFP) が導入され、稼働を開始した。OFP はピーク演算性能が 25PFLOPS であり、「京」コンピュータを抜いて現在日本最速のスーパーコンピュータである。本年度は、筑波大学を中心とした PACS Collaboration を組織し、OFP を用いた新たなプロジェクト研究を開始した。

過去 30 年以上にわたり、格子 QCD は主にハドロン単体の諸性質解明を目指して来た。現在の世界的な状況においては、2 つの大きな問題点が存在する。まず、物理点直上でのシミュレーションが可能になったことは事実だが、実際には物理点のみで物理量の評価を行えるほどの精度を得るレベルには至っていない。次に、現在の格子 QCD シミュレーションに置ける物理量計算は“テーラーメイド”であると評されている。これは、目的とする物理量計算に応じて、適当と思われる物理パラメータ(クォーク質量や空間体積など)を選んでシミュレーションすることを意味している。この場合、例えば、同じゲージ配位を用いた計算であっても、ある物理量に対しては良く実験値と合うが、他の物理量に関しては実験値を再現しないということが起こりうる。OFP を用いたプロジェクトでは、複数の格子間隔において物理点直上で  $(10\text{fm})^3$  超の大空間体積を持つシミュレーションを行うことによって、上記 2 つの課題を克服した計算を実現する。

2016 年度前半は、OFP での大規模計算へ向けて主に Wilson クォーク作用における改良係数の決定と物理点のチューニングを行った。秋以降に OFP の試験運用が開始されたことに合わせて、格子カットオフ $=2.33\text{GeV}$  で  $(10\text{fm})^3$  超の空間体積を持つ 2+1 フレーバー QCD のゲージ配位生成を開始した。物理量の本格計算は 2017 年度以降になる見込みである。

**【2】 格子 QCD によるクォークを自由度とした原子核の直接構成(蔵増、山崎)**

蔵増、山崎は理研計算科学研究機構(AICS)の宇川副機構長との共同研究により、2010 年世界で初めて格子 QCD によるヘリウム原子核の構成に成功し、そののち 2 核子系の束縛状態である重陽子の構成にも成功した。これらの計算は、計算コストを抑えるためにクエンチ近似かつ重いクォーク質量を用いた試験的なものであった。その後、広島大学石川健一准教授を共同研究者に加え、真空偏極効果を取り入れた 2+1 フレーバー QCD シミュレーションを行い、近似を排したより現実世界に近い状況でのヘリウム原子核および 2 核子系の束縛エネルギー計算に成功した。この計算は  $\pi$  中間子質量  $0.5\text{ GeV}$  と  $0.3\text{ GeV}$  のクォーク質量を用いたものであり、物理点( $\pi$  中間子質量  $0.14\text{ GeV}$  に相当)よりもかなり重いものを用いていた。この成果を踏まえ、「京」で生成された  $96^4$  格子サイズのゲージ配位を用いた物理点近傍での軽原子核束縛エネルギー計算を行なっている。現段階では統計的に有意な結果は得られていないが、今後統計誤差を小さくするために計算を継続している。



また、これまでの計算に含まれる可能性のある励起状態からの系統誤差について、重いクォーク質量を用いて調査を行った（論文 B-3）。図 1 には、指数型演算子とウォール型演算子を用いて計算した、有効核子質量の二倍 ( $2m_{\text{eff}}$ ) と有効二核子エネルギー ( $E_{\text{eff}}$ ) を示した。異なる演算子の結果は、小さな虚時間の領域では異なる値を取るが、それぞれの結果が虚時間に依らなくなる領域では一致している。この結果から、異なる演算子から求められた結果は一致すること、つまり励起状態の系統誤差は、 $2m_{\text{eff}}$  と  $E_{\text{eff}}$  の両方が虚時間に依らなくなる領域まで精度良く計算できれば十分抑えられることを示した。これまでの計算で用いた演算子は図の指数型演算子に対応するため、相対的に小さな虚時間領域から励起状態の系統誤差が抑えられた結果が得られていたと考えられる。

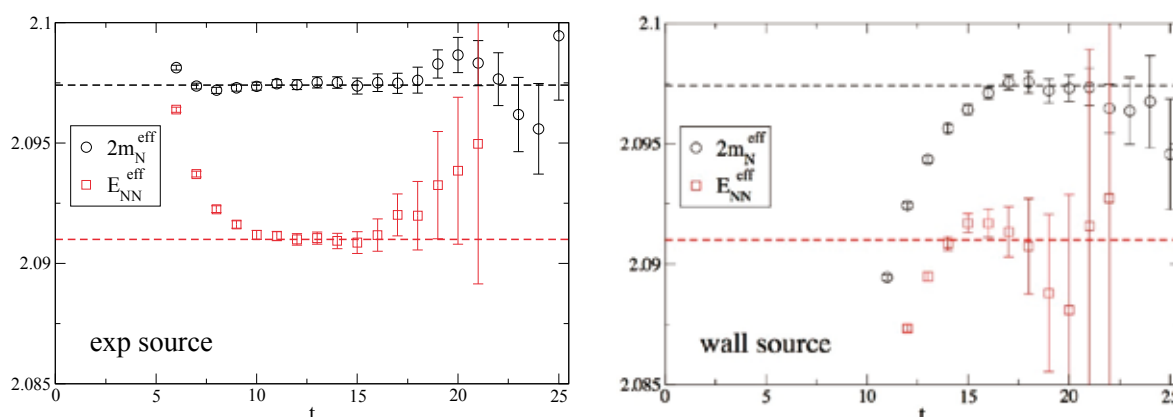


図 1：指数型演算子（左）とウォール型演算子（右）を用いた有効核子質量の二倍 ( $2m_{\text{eff}}$ ) と有効二核子エネルギー ( $E_{\text{eff}}$ )。横軸は虚時間。破線は指数型演算子から得られた値を示す。

### 【3】 格子QCDを用いた核子構造研究（蔵増、山崎）

陽子と中性子（核子）はクォークの束縛状態であり、その構造を詳細に調べるためには、強い相互作用の第一原理計算である格子 QCD を用いた計算が必要である。これまでに格子 QCD を用いて、核子構造に関係する核子形状因子の研究が行なわれてきたが、非常に良い精度で測定されている実験値を再現できていない。この実験値との不一致の主な原因は、計算に用いられたクォーク質量が現実のものよりも大きいためであると考えられている。

蔵増、山崎は、広島大学石川健一准教授、東北大学佐々木勝一准教授、理研計算科学研究機構（AICS）宇川副機構長とともに、PACS Collaboration において、この原因を取り除いた計算である、現実のクォーク質量に極めて近いパラメータ（ $\pi$  中間子質量 145MeV）での核子形状因子計算を行なった（論文 B-1）。図 2 は 200 配位での Dirac 核子形状因子の結果である。クォーク質量が大きなこれまでの計算結果とは異なり、特に小さな運動量移行の領域で実験値に良く一致した結果が得られている。当初の目標であった 200 配位の計算が終了したので、今後軸性カレントに関係する形状因子の解析などを行い、必要なデータを揃え、論文としてまとめる予定である。

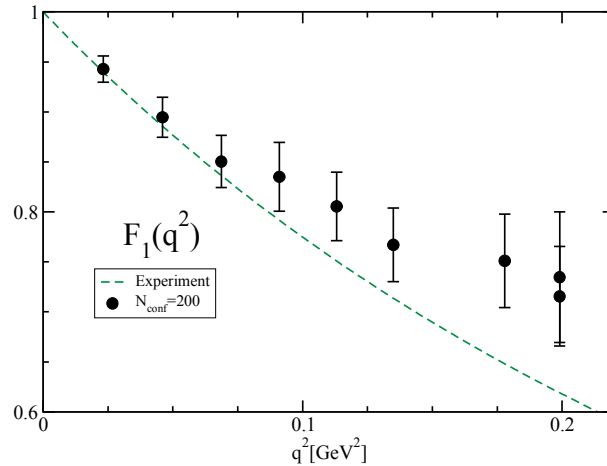


図 2 : Dirac 核子形状因子。横軸は運動量移行、破線は実験値を表す。

#### 【4】 格子 QCD を用いた $\pi$ 中間子形状因子の計算 (山崎)

山崎は、大学院生（博士後期課程 1 年）賀数とともに、PACS Collaboration において、現実的なクォーク質量での  $\pi$  中間子電磁形状因子の計算を行った。この形状因子からは  $\pi$  中間子の平均二乗荷電半径を見積もることができ、 $\pi$  中間子の構造を解明するためには、非常に重要な物理量である。しかし、これまでの多くの  $\pi$  中間子電磁形状因子の計算では、現実よりも大きなクォーク質量を用いていたため、実験値を再現できていなかった。現実的なクォーク質量を用いた本計算から、実験値を再現する形状因子の結果が得られた（論文 B-2）。さらに、この結果にカイラル摂動論の公式を使った解析を行い、平均二乗荷電半径も見積もった。今後、系統誤差の見積もりなどを行った後、研究成果を論文としてまとめる予定である。

#### 【5】 チャームクォーク系の研究 (滑川)

滑川は、京コンピュータにて生成されたゲージ配位を用いて、チャームクォーク系のシミュレーションを行った。Smearing と呼ばれるゲージ場の平滑化操作により、特に繰り込み因子の誤差が大きく削減されることを確認できた。この結果、 $\eta_c$  崩壊定数及びチャームクォーク質量を高精度で計算することが可能になった。他方、チャーモニウムの超微細構造では、有限格子間隔誤差が 10% 程度と予想に反して大きいことが判明した。格子間隔がゼロの連続極限値を求める必要性が定量的に明らかとなった。

#### 【6】 有限温度・有限密度 QCD の研究 (WHOT-QCD Collaboration : 金谷、谷口)

有限温度・有限密度 QCD の相構造と、高温高密度相における QGP (Quark Gluon Plasma) の性質の精密な理解は、初期宇宙の物質進化や物質創成メカニズムの解明への重要なステップだが、終状態に数千個以上の粒子を含む複雑な重イオン衝突実験データから QGP 生成の明確な証

抛とその熱力学特性を引き出すためには、格子QCDによるQCD第一原理からの理論計算が不可欠である。格子QCDの大規模シミュレーションによる有限温度・有限密度QCDの研究を行い、相構造の解明とクォーク物質の熱力学的性質の計算を遂行し、またそのための計算手法開発を進めた。

### (1) 格子 QCD シミュレーションによる有限温度・有限密度 QCD の研究

金谷、谷口らは、有限温度・有限密度 QCD 相構造とクォーク物質の熱力学的諸性質を、ウィルソン型格子クォークを用いた格子 QCD シミュレーションにより導くことを目的として、新潟大学江尻信司准教授、広島大学梅田貴士准教授、九州大学鈴木博教授、大阪大学北沢正清助教らとの共同研究を引き続き推進した。2016 年度は、グラジエントフロー法を応用した研究を大きく進展させた。また、多重点再重み付け法とヒストグラム法を使った手法開発も進め、その応用として、QCD のグルオン部分である  $SU(3)$  ゲージ理論で 1 次相転移点における潜熱の研究や、 $N_f=2$  (2 フレーバー) QCD のカイラル相転移転近傍のスケーリングの研究を行った。並行して、次の段階の研究にむけて、改良 Wilson クォークによる  $N_f=2+1$  QCD の物理点における有限温度配位生成を進めた。

### (2) Gradient flowを用いた有限温度 (2+1)-flavor QCDの研究

グラジエントフロー法に基づく鈴木法によるエネルギー運動量テンソルと状態方程式の計算を、動的クォークを含むQCDで初めて実行した。その為に、改良ウィルソン型クォーク作用による $N_f=2+1$  QCDシミュレーションを遂行した。最終的には現実のクォーク質量による評価を目指しているが、第一段階の研究として、計算時間を抑えるために、sクォーク質量は現実の値に近いがu、dクォークは現実より重い場合 ( $m_\pi/m_\rho \approx 0.74$ ) を扱い、格子間隔が $a \approx 0.07\text{fm}$ の1つだけの固定格子間隔法による計算を実行した。我々の研究により、状態方程式の評価が動的クォークを含む場合でも精度良く遂行可能であることが示された。図3に状態方程式の結果を示す。赤丸がグラジエントフロー法による評価の結果で、黒三角は、同じ配位上でT-積分法を用いて評価した先行研究の結果である。 $T < 300\text{MeV}$  ( $N_t > 8$ ,  $N_t$ は温度軸方向の格子点の数) で従来の方法による結果をよく再現することが示された。他方、この格子間隔では、 $N_t$ が8程度より小さいと ( $T > 300\text{MeV}$ )、 $O(aT)$ の格子化誤差が大きく、両者が一致しなくなることもみてとれる。グラジエントフロー法による評価は、従来の方法で必要であった、非摂動的ベータ関数の評価などが不要で、全体的計算コストを大きく抑えられる可能性がある。この結果は、計算コストの高い物理点での評価を推進する上で、グラジエントフロー法が大きな役割を担うことを示唆している (論文B-9, A-4)。

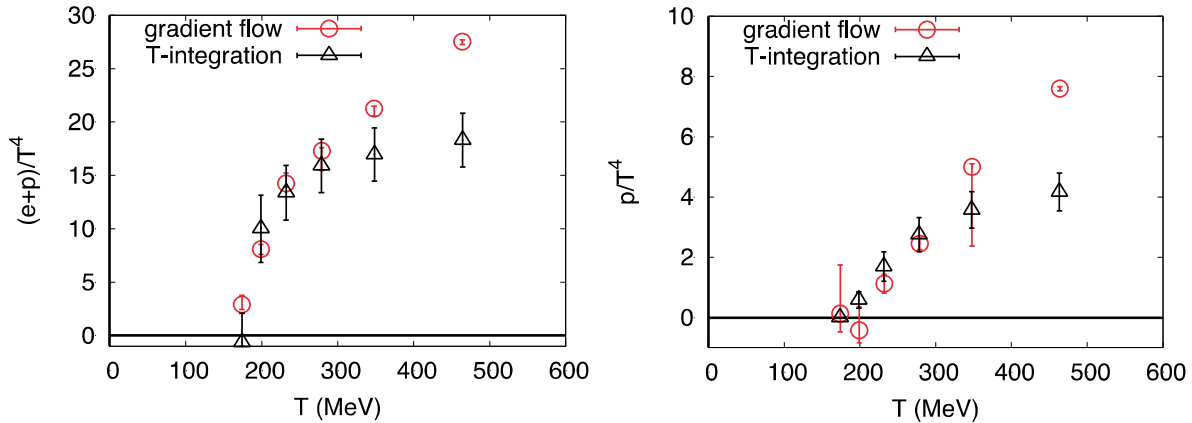


図3：グラジエントフロー法による有限温度(2+1)-flavor QCDの状態方程式の研究。左図：エントロピー密度  $\varepsilon + p$ 。右図：圧力  $p$ 。赤丸がグラジエントフロー法による評価の結果で、黒三角は、同じ配位上でT-積分法を用いて評価した先行研究の結果。横軸は温度  $T$ （論文A-4）。

さらに、同じ有限温度配位を用いて、グラジエントフロー法を用いたカイラル凝縮と位相感受率の評価も行った。格子QCDではこれらの物理量に複雑なくりこみが要求されるが、鈴木法を用いればくりこまれた量を直接評価可能となり、計算コストを大きく抑えられる可能性がある。図4の左図にカイラル感受率の結果を示す。我々は、カイラル感受率がクロスオーバー温度  $T \sim 190 \text{ MeV}$  でピークを示すことを示した。また、 $s$ クォークよりも、軽い  $u, d$ クォークのカイラル感受率の方がより強い特異性を示しており、これも理論的期待と一致する。格子上でカイラル対称性を陽に壊してしまうウィルソン型クォークでこれらが示されたのは初めてである。

さらに、位相電荷と位相感受率の評価も実行した。位相感受率はアクシオン質量と関係しており、アクシオンが冷たい暗黒物質の候補となるかを判定する上で、その温度依存性が重要な情報となる。位相感受率には、ゲージ場を用いた定義による評価とクォークを用いた定義による評価の2種類の計算方法がある。両者は連続理論では一致すべきであるが、格子上では、カイラル対称性などの破れにより、しばしば大きなズレを示し、結果の信頼性に問題を投げかけている。鈴木法を用いればこれらの量も物理的評価を直接行うことができる。図4の右図に我々の位相感受率の結果を示す。赤丸はゲージ場を用いた定義の結果で、黒三角はクォークを用いた定義の結果である。両者の一致が格子上で直接示されたのは初めてである。赤と黒の曲線は高温側でかつ  $N_f > 8$  を満たす3点を  $T$  の冪関数でフィットした結果で、希薄インスタントガス模型（DIGA）から予想される冪をよく再現することを示した（論文B-10, A-3）。

これらはまだ格子間隔1点だけの結果であり、今後異なる格子間隔で同様の計算を行い、連続極限を取る必要がある。また、物理点での研究も同時に推進する計画である。

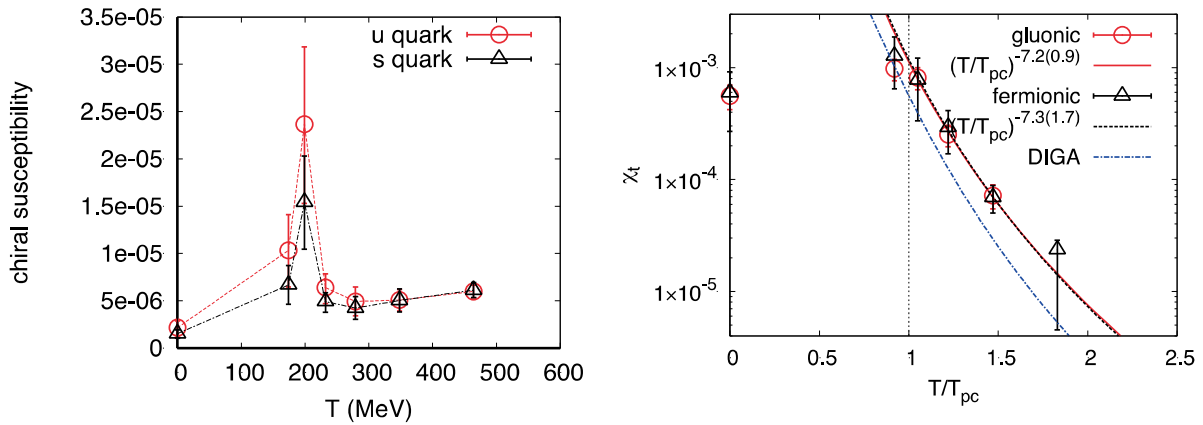


図4：グラジエントフロー法による(2+1)-flavor QCDの熱力学特性の研究。左図：カイラル感受率。赤丸はu, dクォークのカイラル感受率で、黒三角はsクォークのカイラル感受率（論文A-4）。右図：位相感受率。赤丸はゲージ場を用いた定義による評価の結果で、黒三角はクォークを用いた定義による評価の結果（論文A-3）。

### (3) SU(3) ゲージ理論の潜熱

QCDでクォークを取り除いたSU(3)ゲージ理論は、低温の閉じ込め相と高温の非閉じ込め相との間が弱い1次相転移であることが知られている。有限密度QCDでも1次相転移が現れることが理論的に予想されており、その位置や性質をシミュレーションで効率良く評価する手法の開発は重要である。我々は、これまで、多重点再重み付け法とヒストグラム法を組み合わせ、1次相転移やその端点の簡便な検出方法の開発を進めてきた。この研究では、SU(3)ゲージ理論の1次相転移点での潜熱を研究した。

状態方程式(エネルギー密度と圧力)を評価する方法として、この論文では「微分法」を採用した。相転移点はポリアコフループ感受率の極大点として定義できるが、多重点再重み付け法を使って、非等方結合定数空間( $\beta_s, \beta_t$ )におけるポリアコフループ感受率(図5の左図を参照)を計算することにより、感受率の極大線の傾きから、微分法に必要な非等方係数の評価を実行した。次に、シミュレーションヒストリーを高温相と低温相に分離し、状態方程式の2相間の差として潜熱の評価を行った。同じ評価を2種類の空間体積と、 $N_t=6, 8, 12$ の3種類の格子間隔で実行し、空間体積依存性を確認しつつ、連続極限外挿を実行した。調べた格子間隔の範囲では、体積依存性は小さく、図5右図のように連続極限外挿を行って、 $\Delta \epsilon/T^4=0.75(17)$ と $\Delta(\epsilon-3p)/T^4=0.623(56)$ を得た。圧力のギャップは、期待どおり、誤差の範囲でゼロと矛盾しない(論文A-2, B-7)。

これらの研究と並行して、次の段階の研究にむけて、改良Wilsonクォークによる $N_f=2+1$  QCDの物理点における有限温度配位生成を進めた。また、有限温度・有限密度QCDにおけるスケーリングの試験研究も進めた。

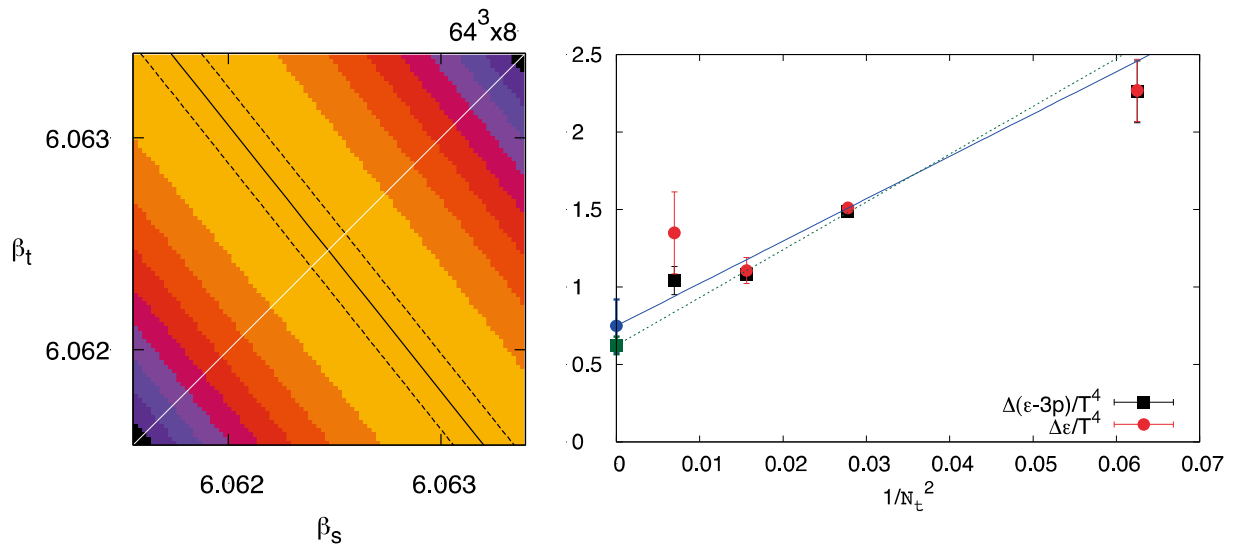


図5：SU(3)ゲージ理論における潜熱の研究。左図：ポリアコフープ感受率の $(\beta_s, \beta_t)$ 依存性。等高線図で、明るい色ほど感受率が高い。64<sup>3</sup>×8格子の結果。右図：潜熱の連続極限外挿（論文A-2）。

#### 【7】 有限バリオン化学ポテンシャルでの QCD 状態方程式の計算（大野）

QCD の状態方程式は、強い相互作用をする物質の熱平衡状態の性質を特徴づける最も基本的なものである。現在、米国 Brookhaven 国立研究所の RHIC 加速器では、QCD 臨界点を見つけることを目的として Beam Energy Scan 実験が行われており、実験結果を理解する上で、有限バリオン化学ポテンシャルでの状態方程式が必要となる。

大野は、Frithjof Karsch 氏を中心とする BNL-Bielefeld-CCNU Collaboration に参加し、2+1 フレーバーの Highly Improved Staggered Quark 作用を用いた格子 QCD シミュレーションを行い、Taylor 展開法により有限バリオン化学ポテンシャルでの QCD 状態方程式を計算した（図 6）。この際、Taylor 展開の 6 次のオーダーまで計算し、その結果を 4 次のオーダーまでの計算結果と比較することで、展開の打ち切り誤差を調べた。その結果、温度の 2 倍程度の化学ポテンシャルまで打ち切り誤差が十分小さいことを示した。また、温度-化学ポテンシャル平面における、圧力、エネルギー及び、エントロピー一定線を計算し、クロスオーバー線や実験結果から求められた freeze-out パラメータとの比較を行った。更に、QCD 臨界点の位置を見積もり、調べる事ができたパラメータ領域には存在しないことを示唆する結果を得た（論文 A-6）。



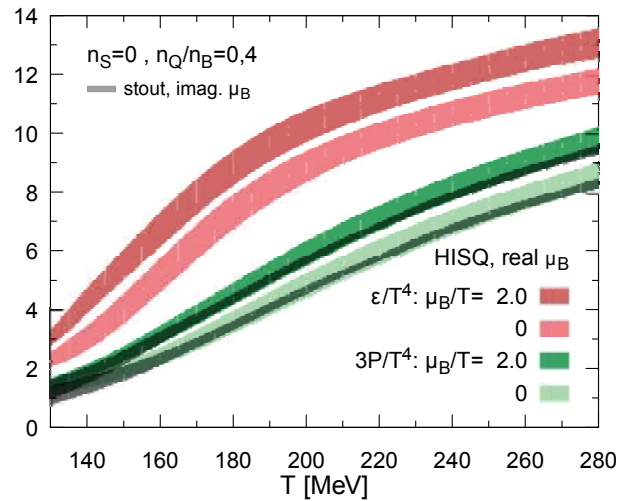


図 6: ストレンジネス中性条件下での、バリオン化学ポテンシャル  $\mu_B/T=0$  及び 2 におけるエネルギー密度 (上 2 つ) 及び圧力 (下 2 つ)。他のグループにより計算された、異なるフェルミオン作用及び、計算方法に基づく圧力の結果も暗色の線で示す。

### 【8】 3 フレーバー有限温度 QCD における臨界終点 (蔵増)

温度  $T$  とクォーク化学ポテンシャル  $\mu$  を関数とする QCD の相図を確定させることは、格子 QCD シミュレーションにおける最大の目標の一つである。蔵増は、理研計算科学研究機構 (AICS) の宇川副機構長、中村研究員、金沢大学武田助教および米国アルゴンヌ国立研究所の Jin 研究員らとの共同研究のもと、0(a) 改良を施した Wilson-Clover クォーク作用と Iwasaki ゲージ作用を用いて、 $T$ 、 $\mu$ 、クォーク質量  $m_q$  のパラメータ空間における 3 フレーバー QCD の臨界終線の決定に取り組んできた。まず、最初のステップとして 2015 年に  $\mu=0$  (密度ゼロ) における 3 フレーバー QCD における臨界終点における  $\pi$  中間子質量 ( $m_{\pi,E}$ ) を決定した (論文発表済)。我々が用いた方法は、尖度 (kurtosis) 交叉法と呼ばれる有限サイズスケリング解析手法の一種であり、一次相転移領域における物理量分布の尖度とクロスオーバー側の対応物が、異なる空間体積依存性を持つ性質を利用している。本研究において、世界で初めて 3 フレーバー QCD における臨界終点の決定に成功した。その後、 $m_{\pi,E}$  の精度向上を目指し、更に細かい格子間隔で計算を行った。図 7 は、 $m_{\pi,E}$  を  $1/NT^2$  ( $NT$  は「時間方向」の格子サイズ) の関数としてプロットしたものである。格子間隔が小さくなるにつれて ( $1/NT^2 \rightarrow 0$ )、 $m_{\pi,E}$  が加速度的に小さくなっていることが見て取れる。これは、連続極限において  $m_{\pi,E}$  の値が非常に小さい、あるいはゼロになる可能性を示唆しているが、従来の理論的予想とは異なっており、大変興味深い。現在、更に細かい格子間隔の計算を実行し、連続極限における  $m_{\pi,E}$  の値がゼロになる可能性の検証に取り組んでいる。

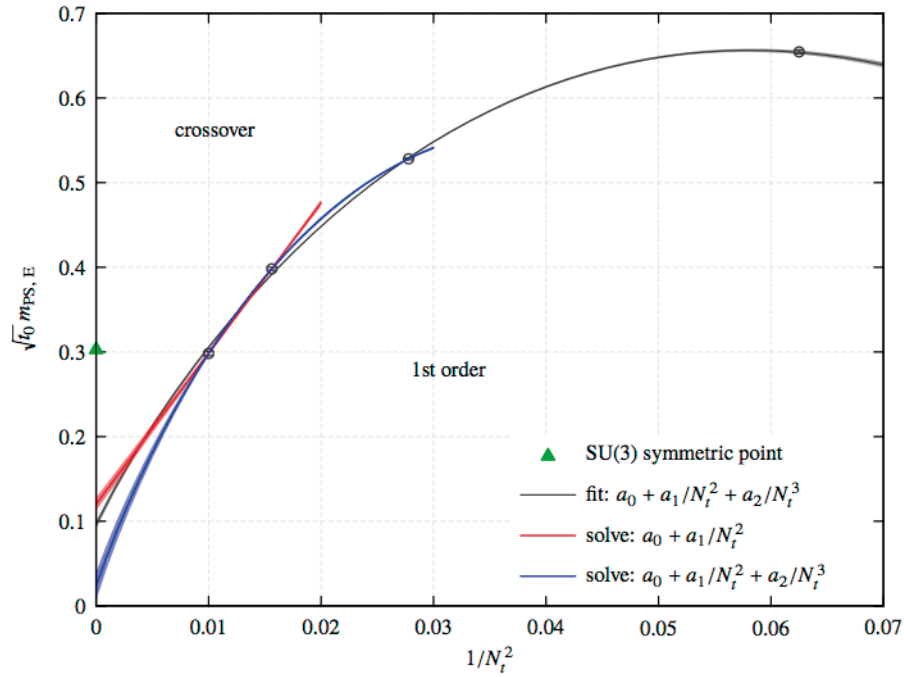


図 7 :  $m_{\pi, E}$  の格子間隔依存性。横軸は  $1/N_t^2$  ( $N_t$  は「時間方向」の格子サイズ)。

#### 【9】 QCD のカイラル相転移の数値的研究 (吉江)

QCD のクォーク・グルーオン相 (高温相) の性質や、高温相からハドロン相 (低温相) への相転移の性質の解明は、初期宇宙の進化に係わる重要な課題である。今日まで多くの研究が行われてきているが、この有限温度相転移の次数についてさえ、結論が得られていない。WMFQCD Collaboration (岩崎(筑波)、石川(広島)、中山(Kavli IPMU)、吉江) は、QCD のカイラル相転移 (クォーク質量ゼロの有限温度相転移) を調べる、従前の手法と異なる新しい手法を提案し、フレーバ数 2 の QCD に対する数値シミュレーションを行い、2 次相転移を強く示唆する結果を得た (論文 A-9)。

新手法では、まず、相転移の次数が 2 次であると仮定し、繰り込み群に基づき、『中間子伝搬関数のスケーリング則』

$$G(\tau; g(N), N) = \left( \frac{N'}{N} \right)^{-2\gamma} G(\tau; g(N'), N')$$

を導出する。G はクォーク質量ゼロの中間子伝搬関数で、格子サイズが異なる 2 つの伝搬関数 (時間方向の格子サイズ  $N, N'$ ) を比較したものである。  $\tau$  は格子サイズで規格化した時間スライス  $\tau = nt/N, n' t/N'$ 、  $g(N), g(N')$  は、そのサイズの格子でのカイラル相転移結合定数であり、  $\beta$  関数で関係付けられ、  $\gamma$  は異常質量次元である。基本的な考え方は、我々が多フレーバ QCD の赤外固定点を同定するのに用いたものと同じである。このスケーリング則から、有効質量  $m(\tau) = -\partial_\tau G(\tau)$  のスケーリング則

$$m(\tau; g(N), N) = m(\tau; g(N'), N')$$



が導かれる。つまり、有効質量は、格子サイズで規格化した時間スライスの関数としてみると、格子サイズには依存しない。同様のスケーリング則は、空間方向の伝搬関数についても成り立つ。

繰り込み群 (RG) 改良したゲージ作用と Wilson フェルミオン作用を用いた格子 QCD のシミュレーションを 3 つの格子サイズ  $16^3 \times 8$ ,  $24^3 \times 12$ ,  $32^3 \times 16$  で行い、(空間方向の) 有効質量を規格化した距離の関数としてプロットすると、格子サイズに依らないユニバーサルな曲線に乗っている事がわかった。この事は、相転移が 2 次であることを示唆している。さらに、得られた曲線は、我々が提唱し、数年間調べてきた『有限の IR cutoff を持つコンフォーマル理論』のコンフォーマル領域での伝搬関数の特徴である、巾変形 Yukawa 型関数となっている事も示された。これは、有限の時空内の QCD には、コンフォーマル領域が存在することの傍証である。

#### 【10】 有限密度 QCD の研究 (谷口)

谷口と大学院生 (博士後期課程 2 年) 鈴木は、カノニカル法を用いた有限密度 QCD の研究を行った。有限密度格子 QCD には複素作用の問題があり、単純なモンテカルロ計算は不可能である。この複素作用の問題を避ける方法として、カノニカル分配関数の導出を主なターゲットとするカノニカル法が有力視されている。カノニカル法を用いると確かに有限密度 QCD が数値計算可能となり、具体的な熱力学量としてカノニカル分配関数を求められるようになる。ところが、物理的には実かつ正定値となるべきカノニカル分配関数が複素数になってしまうという形で符号問題が現れることがわかってきた。これはカノニカル法が克服すべき問題であるが、位相それ自体の性質についてはあまりよく知られていない。そこで鈴木と谷口は、以下の 2 つの点を目標に研究を行った。

(a) カノニカル分配関数の位相の温度依存性と粒子数依存性の調査

(b) 位相が現れるメカニズムとその対策

高温側の結果では位相は 0 と等しく問題はないことがわかるが、低温側の結果では位相は  $\pi/2$  を超えており符号問題が強く現れていることが示唆される。また、位相がバリオン数  $N_b$  におおよそ比例して大きくなっていることが確かめられた。この位相を減らすため、そのもっとも素朴な方法として統計数を上げた計算を試みた。統計が少ない場合は位相が激しく現れるが、統計を上げた場合は  $\pi/2$  を超えない領域もあることが見て取れる。この結果から、統計を上げることによってバリオン数が少ない領域ではある程度位相を抑えることができるということがわかった (論文 A-7, B-12, 13, 14)。

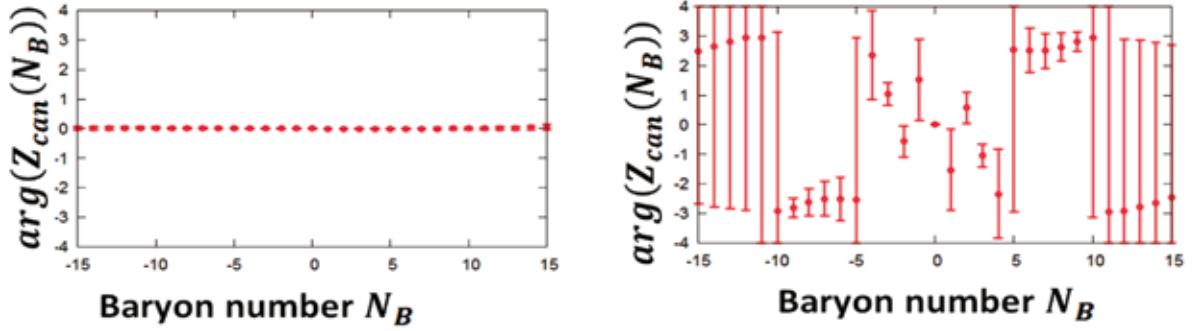


図 8：高温  $T=1.68T_c$ （左）と低温  $T=0.81T_c$ （右）における分配関数の位相。高温側では、結果は 0 と等価で位相は十分制御されている。低温側では、位相が  $\pi/2$  を超えてしまう。カノニカル分配関数は実で正になるべき量である。

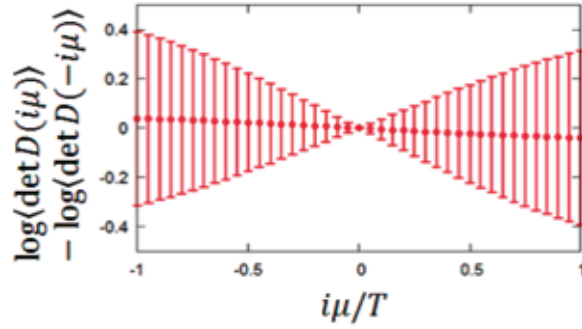


図 9： $\langle\det D(i\mu)\rangle$ と $\langle\det D(-i\mu)\rangle$ の対数同士の差をとった。図は低温  $T=0.81T_c$  での結果。これは 0 になるべき量であるが、モンテカルロ計算においては破れている。

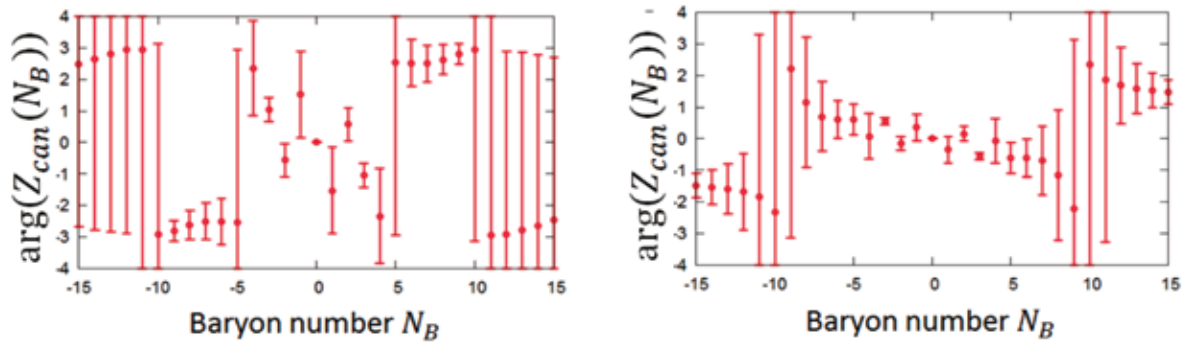


図 10：低温  $T=0.81T_c$  で配位数 100（左）と 900（右）で計算を行った結果。

## 【11】 テンソルネットワーク形式に基づく格子ゲージ理論の研究（藏増、吉村）

格子 QCD 計算では、近年の計算機能力の向上や新規アルゴリズムの開発・改良の結果、自然界の  $u, d, s$  クォーク質量上でのシミュレーションや、更には軽原子核の束縛エネルギー計算までもが可能となりつつある。その一方で、解決すべき長年の課題がそのまま残されていることも事実である。最も重要な課題は、フェルミオン系を扱う際の負符号問題および複素

作用を持つ系のシミュレーションである。これらは、軽いクォークのダイナミクス、Strong CP 問題、有限密度 QCD、格子 SUSY の研究において避けて通れない問題である。われわれは、近年物性物理分野で提案されたテンソルネットワーク形式に基づく分配関数の数値計算手法を格子ゲージ理論へ応用し、モンテカルロ法に起因する負符号問題および複素作用問題を解決し、これまでの格子 QCD 計算が成し得なかった新たな物理研究の開拓を目指している。なお、本研究課題は、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題における 4 つの萌芽的課題のうち、1 番目の課題である「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦」に含まれており、当部門も分担機関として参加し、テンソルネットワーク法の素粒子物理学への応用に取り組んでいる。

2014 年、蔵増と理研計算科学研究機構 (AICS) の清水特別研究員は、テンソル繰り込み群をグラスマン数も扱えるように拡張し(グラスマンテンソル繰り込み群)、世界で初めてフェルミオン入りのゲージ理論への応用に成功した。具体的には、グラスマンテンソル繰り込み群を用いて、 $\theta$  項が有る場合と無い場合の 1 フレーバーの 2 次元格子 Schwinger モデル (2 次元格子 QED) における相構造を調べた(論文発表済)。この研究により、グラスマンテンソル繰り込み群が、現在の格子 QCD 計算が抱える負符号問題や複素作用問題を解決していることを示すことに成功した。今後は、最終目標である 4 次元 QCD への応用に向け、(i) 非可換ゲージ理論への拡張、(ii) 高次元モデルへの応用、(iii) 物理量計算のための手法開発、という 3 つの課題に取り組む必要がある。2016 年度に於いて特に進展があった研究は、グラスマン高次テンソル繰り込み群の開発である。高次テンソル繰り込み群は、高次元 (3 次元以上) モデルに応用可能なアルゴリズムとして考案された方法であるが (テンソル繰り込み群は 2 次元モデル限定)、これまでその対象はボゾン系のみに限られていた。しかしながら、素粒子物理において興味深いモデルはフェルミオンを含んでおり、グラスマン数を扱えるようにすることは必須要件である。蔵増と吉村は、高次テンソル繰り込み群をグラスマン数も扱えるように拡張し、アルゴリズムの正しさと数値精度を確かめるために、3 次元自由 Wilson フェルミオン系の自由エネルギー計算を行った。図 11 は、 $128^3$  格子サイズにおける自由エネルギーの解析解との相対誤差の絶対値  $\delta$  を Wilson フェルミオンの質量パラメータの関数  $m$  としてプロットしたものである。 $D_{\text{cut}}$  はグラスマン高次テンソル繰り込み群において計算精度をコントロールするパラメータであり、原理的に  $D_{\text{cut}}$  が大きいほど数値精度が向上する。図 11 では、 $D_{\text{cut}}=6, 10, 14$  の結果が示してあるが、いずれも現在の標準的なクラスター計算機 (演算加速機構なし) において 1 ノード・日で計算可能なレベルの計算コストである。 $m \geq 0$  の範囲において相対誤差 1% 未満の精度を達成できており、アルゴリズムの正しさと高精度計算の可能性を確認することができた。なお、現在はフェルミオンの Green 関数を計算するための手法開発に取り組んでいる。

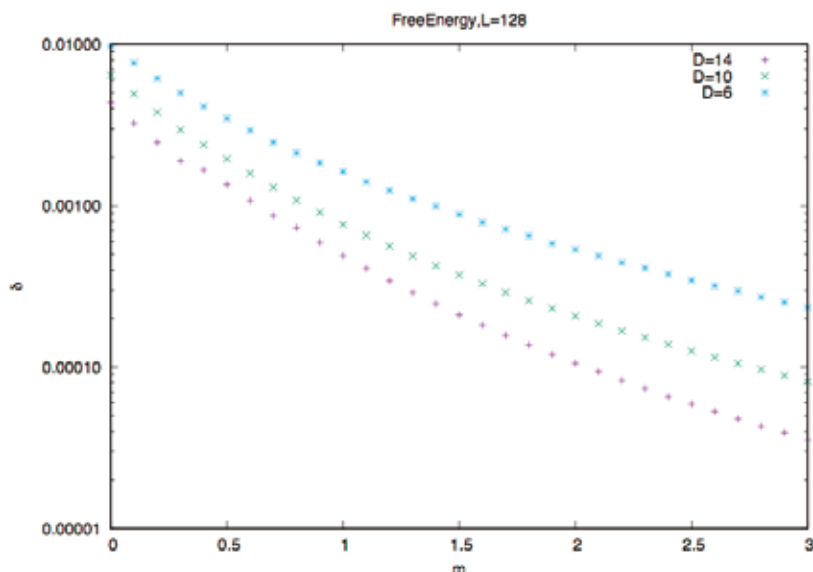


図 11:  $128^3$  格子サイズにおける 3 次元自由 Wilson フェルミオン系の自由エネルギー計算。横軸は Wilson フェルミオンの質量パラメータ。

## 【12】 素粒子標準模型を超えた理論の探索 (山崎)

ウォーキングテクニカラー模型は素粒子標準模型を超えた理論の有力な候補である。この模型は、強結合ゲージ理論のダイナミクスにより、素粒子標準模型では手で与えられていた電弱対称性の自発的破れの起源を説明できる可能性がある。しかし、この模型を構築するために必要な強結合ゲージ理論には、近似的共形対称性を持つなど、特殊な条件が課されている。山崎は、名古屋大学素粒子宇宙起源研究機構 (KMI) を中心とした LatKMI Collaboration の研究者、名古屋大学山脇幸一名誉教授、KEK 青木保道特任准教授らと共に、格子ゲージ理論を用いた数値計算から、そのような条件を満たすゲージ理論が存在するか否かの探索を行っている。これまでの 4、8、12 フレーバー SU(3) ゲージ理論の研究から、8 フレーバー理論がそれら条件を満たす可能性がある事を示した。今年度は、これまでに行った計算よりも、大きな体積、軽いフェルミオン質量のデータを加え、さらに核子や  $a_0$  中間子などの様々なハドロンについて解析を行った。その結果、これまでの研究で見えていた近似的共形対称性らしき性質が様々なハドロンでも見えることを示した (論文 A-8)。

## 【13】 Gradient flow を用いた Kaon B パラメーターの計算 (谷口)

Kaon B パラメーター  $B_K$  は K 中間子の  $K_0$ - $\bar{K}_0$  混合に対する QCD の寄与を抽出した量であり、QCD の非摂動論的な効果が主として効いてくる量であるため格子上の数値計算による測定が必須となる量である。この  $B_K$  を Wilson fermion を用いて計算しようとする、カイラル対称性の破れからくる余計な演算子混合に邪魔されて精度の良い測定が困難となる事情があった。このカイラル対称性の破れからくる余計な演算子混合の問題に対する解決策として、

gradient flow を用いる方法が有力視されている。Gradient flow は一種のくりこみ変換であり、あらゆる演算子に対して非常に簡単に変換を実行することができる。Gradient flow の優れた美点として flow を課した演算子には紫外発散が現れないという点が挙げられる。そのため格子上のいかなる対称性の破れにも悩まされることなく、連続極限を単純な操作として取ることができるようになるのである。Gradient flow を課した演算子は繰り込まれた演算子を含む有限な量となっているのであるが、鈴木と谷口は研究の第一歩として gradient flow を課した 4 fermi 演算子から、高エネルギー物理学で一般的に用いられる  $\overline{\text{MS}}$  scheme で繰り込まれた演算子を取り出すための変換係数の計算を行なった。

#### 【14】 スパースモデリングを用いた格子 QCD データの解析 (山崎)

山崎は、大学院生 (博士前期課程 2 年) 佐久間とともに、近年、画像処理、機械学習の分野を中心に様々な分野で応用され始めた、スパースモデリングを格子 QCD データ解析に応用するための基礎研究を行った。格子 QCD で計算されるハドロン 2 点相関関数は、様々な状態の指数関数の和として表せる。励起状態を解析するには、この指数関数の和から特定の状態の寄与を取り出さなくてはならないため、数値的に不安定になりやすく、解析が非常に難しい。この解析にスパースモデリングを用いる試験的解析を行い、指数関数の個数を固定しないスパースモデリングの解析では、データから指数関数の数を決めることができ、その解析から得られた質量などの結果は、事前にデータに最適な個数に指数関数を固定した解析結果と一致することを示した。スパースモデリングの解析は、うまく機能する場合もあるが、そうでない場合もあるため、格子 QCD の解析に応用するには様々な課題が残されており、今後も研究が必要である。 □

#### 【15】 格子 QCD 研究用データグリッド JLDG/ILDG の運用 (吉江)

JLDG (Japan Lattice Data Grid) は、国内の計算素粒子物理研究グループが日々の研究データを管理・共有する為のデータグリッドである。主システムは、国内の主要な格子 QCD 研究拠点 7 箇所に設置したファイルサーバを国立情報学研究所が提供する SINET VPN で接続し、グリッドファイルシステムソフトウェア Gfarm で束ねたファイルシステムである。どの拠点からアクセスしても同一のファイルシステムが見えるので、「ある拠点のスパコンで生成したデータ (格子 QCD 配位など) を JLDG に投入・蓄積し、別拠点で読み出して、その拠点のスパコンで再解析 (物理量の計算) をおこなう」といったデータ共有を、容易におこなう事ができる。また、サブシステムとして、HPCI 共用ストレージとの連携システムと ILDG (International Lattice Data Grid) との接続システムを備えている。JLDG の運用は、各拠点の代表者、研究グループの代表者、システム開発者、管理運用支援の委託先の業者の担当

者、をメンバーとする JLDG チームが行っており、筑波大学からは、建部（高性能計算システム研究部門）、天笠（計算情報学研究部門）と山崎、吉江が参加している。

JLDG は 2005 年に開発を開始し、2007 年に運用を開始した。現在、国内の複数の大きな研究グループが研究インフラとして使用している。JLDG は実用システムとして、一定の完成の域に達しており、数年前から、システムの改良や新機能の実装よりも、システムの増強・安定運用に主眼が移ってきている。図 12 に、現在のシステム状況と、ディスク使用量の推移を示した。

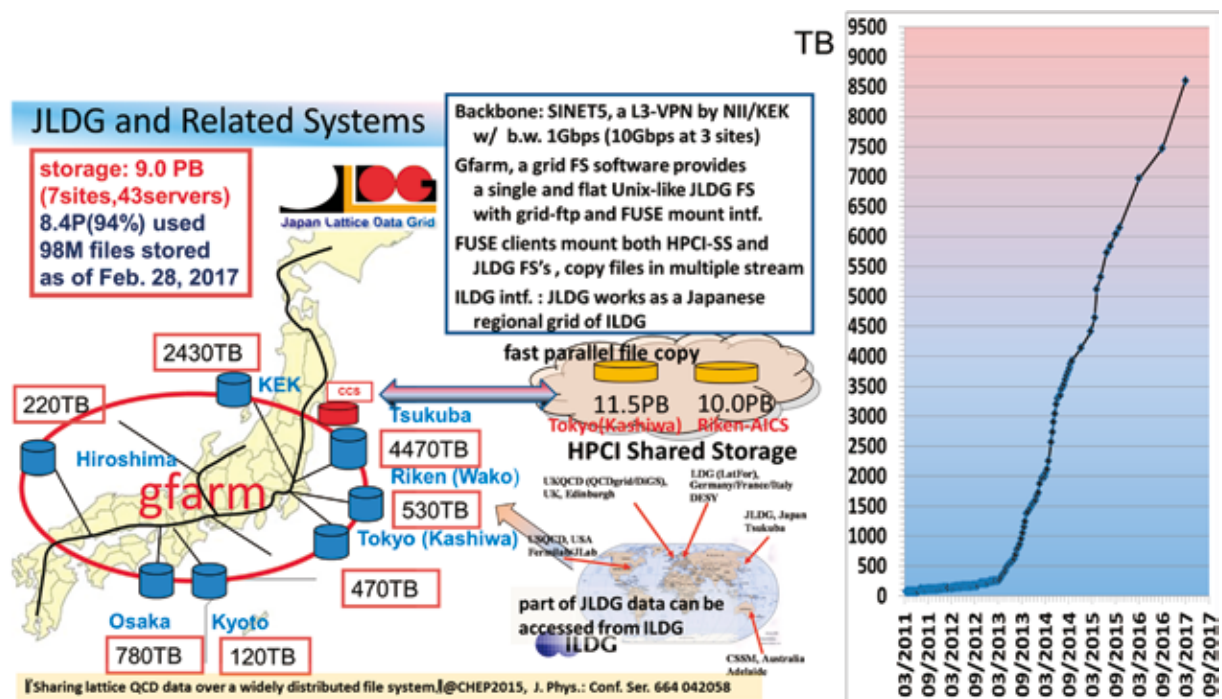


図 12 : JLDG のシステム状況とディスク使用量の推移。

今年度は、以下のシステム増強と安定運用の為に活動をおこなった。

- ファイルサーバの増強: 前年度 39 サーバ 7.5PB から 43 サーバ 9.0PB へ
- 体制変更 (HPCI 戦略分野終了、名古屋大学拠点廃止) に伴う作業
- ソフトウェア更新 (gfarm2 回、zabbix1 回、HPCI-SS 連携方式改良)
- 管理機器更新
- 管理サーバ 7 台を仮想化して 2 台の物理ホストに集約
- 古い OS を一掃し、バックアップも容易になった。
- データ化け対応
- 大容量のファイルシステムでは、種々の理由により、ユーザーや管理者が気づかないまま、データが化ける (silent data corruption) 可能性がある。JLDG では、フ

ファイル作成時に on-the-fly で md5sum を計算し、データベースに登録したり照合する機能を導入している。

- 今年度は、さらに、ファイル作成直後（6 時間後）に再度読み出し検証する仕組みを導入した。
- 0(20) ファイルのデータ化けを検出し、不正ファイルを削除した。全てのケースで、正しい複製がありユーザーへの影響はなかった。
- 公開アンサンブルへの DOI 登録
  - ILDG は 5 つの地域グリッドを、『格子 QCD 配位の国際規模での共有』を目的として相互運用する仕組みであり、JLDG は ILDG の日本の地域グリッドである。ILDG には、「公開されている格子 QCD 配位アンサンブルの利用状況を把握する仕組みが無い」事が問題であった。論文の引用・被引用の記録とは別に、データの引用・被引用関係の記録を蓄積する目的で、ILDG に公開する QCD アンサンブルに DOI (Digital Object Identifier) 登録を行う事が提案され、米国地域グリッドでは、実施済である。
  - JLDG では、天笠、松古 (KEK)、吉江が中心となって、DOI 登録の体制面の検討と各関係機関との調整を行って、DOI 登録は JICFuS (計算基礎科学連携拠点) の活動として位置付けること、筑波大計算科学研究センターが、DOI 登録機関の会員となり、実際の登録業務とデータへのアクセスを保証する仕組みに責任を持つこととなった。
  - 今年度は、DOI 登録に必要なソフトウェア回りの開発 (登録フォーム、ILDG QCDml ensemble xml と補足情報からの landing page の生成) を行なった。また、登録の規約や手続き (登録作業のフロー) についても検討を行い、JICFuS で検討する叩き台がほぼ完成した。

## 【16】 格子 QCD 共通コード開発 (金谷、谷口、根村、浮田、滑川)

昨年度に引き続き、格子 QCD 共通コード Bridge++の開発を進めた。格子 QCD 共通コード Bridge++は、QCD を含む格子ゲージ理論シミュレーションのための汎用コードセットである。様々な格子作用やアルゴリズムを適用可能で、ノート PC から超並列計算機まで幅広いアーキテクチャに対応している。2012 年 7 月に Bridge++ ver. 1.0.0 を公開して以降、継続してコードの改善、拡張を行っている (<http://bridge.kek.jp/Lattice-code/>)。素粒子理論グループからは、金谷、滑川、根村、谷口、浮田が参加している。

本年度は、ライブラリ化向けコード構造への変更、パラメータのコンテナ化、ヘッダー相対化といったシステム面での強化が図られた。また、ゲージ場テンソル追加、中間子系演算子追加など物理量測定を機能拡張した。これらの変更を含めた Bridge++ ver. 1.4.0 へのメジャーアップデートが 2017 年 3 月に実施された。その後も、コードの細かい改定、改良が進め

られている。最新版は ver. 1.4.1 である。また、共通コードを使用した研究論文が、今年度新たに 10 本追加された。通算 23 本の論文が共通コードを元に発表されている。

#### 4. 教育

##### 【1】 学位論文

[修士論文]

1. 佐久間弘基「スパースモデリングを用いた格子 QCD における相関関数の解析」

##### 【2】 集中講義

1. 藏増嘉伸、神戸大学システム情報学研究科客員教授（2016年4月～2016年9月）  
「計算科学特論」（集中講義）を担当。

#### 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

##### 【1】 受賞

##### 【2】 外部資金

1. 青木慎也（代表）、一般受託研究、平成26年度採択、『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発』重点課題9：「宇宙の基本法則と進化の解明」、240,000千円
2. 金谷和至（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成27年度採択、「有限温度・有限密度クォーク物質の物性と相構造」、900千円
3. 藏増嘉伸（分担）、一般受託研究、平成28年度採択、『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発』萌芽的課題1：「基礎科学のフロンティアー 極限への挑戦（基礎科学の挑戦ー複合・マルチスケール問題を通した極限の探求）」、16,900千円
4. 藏増嘉伸（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(B)、平成27年度採択、「テンソルネットワーク形式による格子ゲージ理論の研究」、4,800千円
5. 石塚成人（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(B)、平成27年度採択、「格子QCDによるK中間子崩壊の直接的CP非保存パラメータの決定」、3,500千円
6. 山崎剛（代表）、科学研究費補助金・若手研究(A)、平成28年度採択、「量子色力学を基にした原子核構造の解明へ向けた基礎研究」、3,600千円



7. 浮田尚哉（代表）、科学研究費補助金、挑戦的萌芽研究、平成28年度採択、「格子数値計算による超対称性の自発的破れの解明」、1,000千円
8. 滑川裕介（代表）、科学研究費補助金・基盤研究(C)、平成27年度採択、「格子量子色力学による新たなハドロン存在形態の解明」、910千円

**【3】 知的財産権（種別、氏名、課題名、年月日）**

**6. 研究業績**

**(1) 研究論文**

**A) 査読付き論文**

1. Y. Kuramashi, N. Nakamura, S. Takeda, and A. Ukawa, “Critical endline of the finite temperature phase transition for 2+1 flavor QCD around the SU(3)- flavor symmetric point”, Phys. Rev. D94 (2016) ref. 114507.
2. M. Shirogane, S. Ejiri, R. Iwami, K. Kanaya, M. Kitazawa, “Latent heat at the first order phase transition point of SU(3) gauge theory”, Phys. Rev. D 94, No.1 (2016) ref.014506.
3. Y. Taniguchi, K. Kanaya, H. Suzuki, and T. Umeda, “Topological susceptibility in finite temperature (2+1)-flavor QCD using gradient flow”, Phys. Rev. D 95, No.5 (2017) ref.054502.
4. Y. Taniguchi, S. Ejiri, R. Iwami, K. Kanaya, M. Kitazawa, H. Suzuki, T. Umeda, and N. Wakabayashi (WHOT-QCD Collaboration), “Exploring  $N_f=2+1$  QCD thermodynamics from gradient flow”, arXiv:1609.01417[hep-lat].
5. F. Karsch, A. Bazavov, H.-T. Ding, P. Hegde, O. Kaczmarek, E. Laermann, Swagato Mukherjee, H. Ohno, P. Petreczky, C. Schmidt, S. Sharma, W. Soeldner, P. Steinbrecher, and M. Wagner, “Conserved Charge Fluctuations from Lattice QCD and the Beam Energy Scan”, Nucl. Phys. A 956 (2016) ref. 352.
6. A. Bazavov, H.-T. Ding, P. Hegde, O. Kaczmarek, F. Karsch, E. Laermann, Y. Maezawa, Swagato Mukherjee, H. Ohno, P. Petreczky, H. Sandmeyer, P. Steinbrecher, C. Schmidt, S. Sharma, W. Soeldner, and M. Wagner, “The QCD Equation of State to  $O(\mu_B^6)$  from Lattice QCD”, Phys. Rev. D 95, No. 5 (2017) ref. 054504.
7. A. Nakamura, S. Oka, and Y. Taniguchi, “QCD phase transition at real chemical potential with canonical approach”, Journal of High Energy Physics, 2016(2), 1-19.
8. Y. Aoki, T. Aoyama, Ed Bennett, M. Kurachi, T. Maskawa, K. Miura, K. Nagai, H. Ohki, E. Rinaldi, A. Shibata, K. Yamawaki, and T. Yamazaki (LatKMI Collaboration),

“Light flavor-singlet scalars and walking signals in  $N_f=8$  QCD on the lattice” ,  
arXiv:1610.07011.

9. K.-I. Ishikawa, Y. Iwasaki, Yu Nakayama, and T.Yoshié, “RG scaling relations at chiral phase transition in two-flavor QCD” , arXiv:1704.03134 [hep-lat].

## B) 査読無し論文

1. PACS Collaboration: K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, N. Tsukamoto, S. Sasaki, T. Yamazaki, and A. Ukawa, “Nucleon form factors near the physical point in 2+1 flavor QCD” , Proceeding of Science (LATTICE 2016) 158.
2. PACS Collaboration: J. Kakazu, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié, “Electromagnetic pion form factor near physical point in  $N_f=2+1$  lattice QCD” , Proceeding of Science (LATTICE 2016) 160.
3. PACS Collaboration: T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, and A. Ukawa, “Systematic study of operator dependence in nucleus calculation at large quark mass” , Proceeding of Science (LATTICE 2016) 108.
4. S. Takeda, X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, N. Nakamura, and A. Ukawa, “Update on  $N_f=3$  finite temperature QCD phase structure with Wilson-Clover fermion action” , Proceeding of Science (LATTICE 2016) 384.
5. T. Boku, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, L. Meadows, M. D ‘Mello, M. Troute, and R. Vemuri, “A performance evaluation of CCS QCD Benchmark on the COMA (Intel® Xeon Phi™, KNC) system” , Proceeding of Science (LATTICE 2016) 261.
6. S. Motoki, S. Aoki, T. Aoyama, K. Kanaya, H. Matsufuru, T. Miyamoto, Y. Namekawa, H. Nemura, Y. Taniguchi, S. Ueda, and N. Ukita, “Lattice QCD code Bridge++ on arithmetic accelerators” , Proceeding of Science (LATTICE 2015) 040.
7. T. Umeda, S. Ejiri, R. Iwami, and K. Kanaya, “Towards the QCD equation of state at the physical point using Wilson fermion” , Proceeding of Science (LATTICE 2015) 209.
8. S. Ejiri, R. Iwami, M. Shirogane, N. Wakabayashi, K. Kanaya, M. Kitazawa, H. Suzuki, Y. Taniguchi, and T. Umeda, “Determination of latent heat at the finite temperature phase transition of SU(3) gauge theory” , Proceeding of Science (LATTICE 2016) 058.
9. K. Kanaya, S. Ejiri, R. Iwami, M. Kitazawa, H. Suzuki, Y. Taniguchi, T. Umeda, and N. Wakabayashi, “Equation of state in (2+1)-flavor QCD with gradient flow” , Proceeding of Science (LATTICE 2016) 063.

10. Y. Taniguchi, S. Ejiri, K. Kanaya, M. Kitazawa, H. Suzuki, T. Umeda, R. Iwami, and N. Wakabayashi, “Temperature dependence of topological susceptibility using gradient flow”, Proceeding of Science (LATTICE 2016) 064.
11. T. Umeda, S. Ejiri, R. Iwami, K. Kanaya, H. Ohno, A. Uji, N. Wakabayashi, and S. Yoshida, “ $O(4)$  scaling analysis in two-flavor QCD at finite temperature and density with improved Wilson quarks”, Proceeding of Science (LATTICE 2016) 376.
12. A. Nakamura, S. Oka, and Y. Taniguchi, “Study of high density phase transition in lattice QCD with canonical approach”, Proceeding of Science (LATTICE 2015) 165.
13. A. Nakamura, S. Oka, A. Suzuki, and Y. Taniguchi, “Calculation of high-order cumulants with canonical ensemble method in lattice QCD”, Proceeding of Science (LATTICE 2015) 168.
14. R. Fuluda, A. Nakamura, S. Oka, S. Sakai, A. Suzuki, and Y. Taniguchi, “Beating the sign problem in finite density lattice QCD”, Proceeding of Science (LATTICE 2015) 208.

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. Y. Kuramashi, 「Tensor Network Scheme for Lattice Gauge Theories」, Phase structure of lattice field theories - Japanese-German Seminars 2016 - (Niigata University, Niigata, Japan, September 26-28, 2016).
2. H. Ohno, 「A stochastic method to reconstruct spectral functions and its application to quarkonium spectral functions」, Advances in transport and response properties of strongly interacting systems (ECT\*, Trento, Italy, May 2-6, 2016).
3. H. Ohno, 「Quarkonia at  $T \neq 0$  and Heavy Quark Diffusion from Lattice QCD」, RHIC & AGS Annual Users' Meeting 2016 (BNL, NY, USA, June 7-10, 2016).
4. H. Ohno (BNL-Bielefeld-CCNU Collaboration), 「The QCD Equation of State at non-vanishing chemical potential from Lattice QCD」, QCD in Finite Temperature and Heavy-Ion Collisions, (BNL, NY, USA, February 13-15, 2017).
5. T. Yamazaki for PACS Collaboration, 「Light nuclei and nucleon form factors from  $N_f=2+1$  lattice QCD」, CCS-LBNL Collaborative Workshop 2016 (Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, Japan, May 12-13, 2016).
6. T. Yamazaki for PACS Collaboration, 「Direct calculation of light nucleus from lattice QCD」, Phase structure of lattice field theories - Japanese-German Seminar 2016 - (Niigata, Japan, September 26-28, 2016).

7. T. Yamazaki for PACS Collaboration, 「Direct calculation of light nucleus from lattice QCD」, First Tsukuba-CCS-RIKEN joint workshop on microscopic theories of nuclear structure and dynamics (RIKEN/Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, Japan, December 14-16, 2016).
8. K. Kanaya, 「Thermodynamics in (2+1)-flavor QCD with gradient flow method」, Phase structure of lattice field theories, Japanese-German Seminar 2016 (Niigata Univ., Niigata, Japan, Sept. 26-28, 2016).
9. Y. Taniguchi, 「Temperature dependence of topological susceptibility using gradient flow」, Phase structure of lattice field theories, Japanese-German Seminar 2016 (Niigata, Japan, Sept. 26-28, 2016).

## B) 一般講演

1. Y. Kuramashi, 「Nucleon form factors near the physical point in 2+1 flavor QCD」, 34th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2016) (University of Southampton, Southampton, UK, July 24-30, 2016).
2. K. Kanaya, 「Recent results of particle physics simulations at Tsukuba」, Collaboration workshop between Tsukuba and Edinburgh universities (Univ. Edinburgh, Edinburgh, UK, June 16-17, 2016).
3. K. Kanaya, S. Ejiri, R. Iwami, M. Kitazawa, H. Suzuki, Y. Taniguchi, T. Umeda, and N. Wakabayashi, 「Equation of state in (2+1)-flavor QCD with gradient flow」, The XXXIV International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2016) (Univ. Southampton, Southampton, UK, July 24-30, 2016).
4. Y. Taniguchi, S. Ejiri, R. Iwami, K. Kanaya, M. Kitazawa, Hiroshi Suzuki, Takashi Umeda, and Naoki Wakabayashi, 「Temperature dependence of topological susceptibility using gradient flow」, The XXXIV International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2016) (Univ. Southampton, Southampton, UK, July 24-30, 2016).
5. K. Kanaya, S. Ejiri, R. Iwami, M. Kitazawa, H. Suzuki, Y. Taniguchi, T. Umeda, and N. Wakabayashi, 「Topological susceptibility in finite-temperature (2+1)- flavor QCD with gradient flow」, The 14th International workshop on QCD in eXtreme conditions (XQCD 2016) (Plymouth Univ., Plymouth, UK, Aug. 1-3, 2016)
6. Y. Taniguchi, S. Ejiri, R. Iwami, K. Kanaya, M. Kitazawa, H. Suzuki, T. Umeda, and N. Wakabayashi, 「QCD energy momentum tensor at finite temperature using gradient

- flow」, The 14th International workshop on QCD in eXtreme conditions (XQCD 2016) (Plymouth Univ., Plymouth, UK, Aug. 1-3, 2016).
7. H. Ohno, 「Stochastic reconstruction of charmonium spectral functions at finite temperature」, 34th International Symposium on Lattice Field Theory (University of Southampton, Southampton, UK, July 24-30, 2016).
  8. H. Ohno, 「Charmonium and bottomonium spectral functions and the heavy quark diffusion coefficient from lattice QCD」, 38th International Conference on High Energy Physics (Sheraton Grand Hotel, Chicago, USA, August 3-10, 2016).
  9. H. Ohno, 「Quarkonium spectral functions at finite temperature with stochastic reconstruction methods」, Phase structure of lattice field theories - Japanese-German Seminar 2016 - (Niigata University "Tokimate", Niigata, Japan, September 26-28, 2016).
  10. H. Ohno (BNL-Bielefeld-CCNU Collaboration), 「The QCD Equation of State at  $\mu_B \neq 0$  from Lattice QCD」, 7th Workshop of the APS Topical Group on Hadronic Physics (Marriott Wardman Park Hotel, Washington DC, USA, February 1-3, 2017).
  11. H. Ohno, 「Quarkonium spectral functions and heavy quark diffusion of charm and bottom quarks from lattice QCD at finite temperature」, The XXVI international conference on ultrarelativistic heavy-ion collisions (Hyatt Regency Chicago, Chicago, USA, February 5-11, 2017).
  12. A. Suzuki, 「Complex phase problem in the canonical approach」 Phase structure of lattice field theories Japanese-German Seminar 2016 (Niigata University, 26-28 September, 2016).
  13. T. Yamazaki, K. Ishikawa, Y. Kuramashi, and A. Ukawa for PACS Collaboration, 「Systematic study of operator dependence in nucleus calculation at large quark mass」, The 34th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2016) (University of Southampton, UK, July 24-30, 2016).
  14. J. Kakazu, K.I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié for PACS Collaboration, 「Electromagnetic pion form factor near physical point in  $N_f=2+1$  Lattice QCD」, The 34th International Symposium on lattice field theory (Lattice 2016) (University of Southampton, UK, July 24-30, 2016).
  15. J. Kakazu, K.I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié for PACS Collaboration, 「Electromagnetic pion form factor near physical point in  $N_f=2+1$  Lattice QCD」,

Phase structure of lattice field theories - Japanese-German Seminar 2016 - (Niigata, Japan, September 26-28, 2016).

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 藏増嘉伸, 「テンソルネットワーク法の素粒子物理学への応用」, ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦 - 複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」キックオフミーティング (東北大学, 仙台, 2016年9月9日).
2. 山崎 剛, 「格子 QCD を用いた原子核直接計算」, 第8回学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出シンポジウム (筑波大学, つくば, 2016年10月17-18日).

#### B) その他の発表

1. 金谷和至, 「Gradient flow 法で探る  $N_f=2+1$  QCD 熱力学」, 理研シンポジウム・iTHES 研究会「熱場の量子論とその応用」(理化学研究所, 和光, 2016 年 8 月 22 日-24 日).
2. 金谷和至, 石見涼, 梅田貴士, 江尻信司, 北沢正清, 鈴木博, 谷口裕介, 若林直輝, 「Gradient flow による  $(2+1)$ -flavor QCD 状態方程式」, 日本物理学会秋季大会 (宮崎大学木花キャンパス, 宮崎, 2016 年 9 月 20-24 日).
3. 谷口裕介, 石見涼, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 鈴木博, 若林直輝, 「Gradient flow で探る topological susceptibility の温度依存性」, 日本物理学会秋季大会 (宮崎大学木花キャンパス, 宮崎, 2016 年 9 月 20-24 日).
4. 谷口裕介, 石見涼, 梅田貴士, 江尻信司, 金谷和至, 北沢正清, 鈴木博, 若林直輝, 「Gradient flow を課したら中間子相関関数はどうなる?」, 日本物理学会第 72 回年次大会 (大阪大学豊中キャンパス, 大阪, 2017 年 3 月 17 日-20 日).
5. 大野浩史, 「Stochastic 法を用いたクォークoniumスペクトル関数の解析」, 理研シンポジウム・iTHES 研究会「熱場の量子論とその応用」(理化学研究所, 和光, 2016 年 8 月 22 日-24 日).
6. 大野浩史, 「Stochastic 法を用いたクォークoniumスペクトル関数の研究」, 日本物理学会第 72 回年次大会 (大阪大学豊中キャンパス, 大阪, 2017 年 3 月 17 日-20 日).
7. 鈴木遊, 岡将太郎, 谷口裕介, 中村純, 「カノニカル法における符号問題の研究」, 日本物理学会秋季大会 (宮崎大学木花キャンパス, 宮崎, 2016 年 9 月 20-24 日).
8. 鈴木遊, 谷口裕介, 「Gradient Flow を用いた  $K$  中間子の  $B$  パラメータの計算」, 日本物理学会第 72 回年次大会 (大阪大学豊中キャンパス, 大阪, 2017 年 3 月 17 日-20 日).

9. 鈴木遊, 岡将太郎, 谷口裕介, 中村純, 「カノニカル法における分配関数の位相の研究」, 理研シンポジウム・iTHES 研究会「熱場の量子論とその応用」(理化学研究所, 和光, 2016 年 8 月 22 日-24 日).
10. 賀数淳平, 石川健一, 石塚成人, 藏増嘉伸, 中村宜文, 滑川裕介, 谷口裕介, 浮田尚哉, 山崎剛, 吉江友照 for PACS Collaboration, 「格子 QCD によるパイオンの形状因子の研究」, 2016 年度原子核三者若手夏の学校 (黒姫ライジングサンホテル, 長野, 2016 年 7 月 31 日-8 月 5 日).
11. 山崎剛, 石川健一, 藏増嘉伸, 宇川彰 for PACS Collaboration, 「重いクォークを用いた軽原子核直接計算の系統的研究」, 日本物理学会秋季大会 (宮崎大学木花キャンパス, 宮崎, 2016 年 9 月 20-24 日).
12. 賀数淳平, 石川健一, 石塚成人, 藏増嘉伸, 中村宜文, 滑川裕介, 谷口裕介, 浮田尚哉, 山崎剛, 吉江友照 for PACS Collaboration, 「 $N_f=2+1$  格子 QCD による物理点質量近傍での  $\pi$  中間子形状因子の研究」, 日本物理学会秋季大会 (宮崎大学木花キャンパス, 宮崎, 2016 年 9 月 20-24 日).
13. 山崎剛, 佐々木勝一, 藏増嘉伸, 石川健一, 浮田尚哉, 「格子 QCD を用いた原子核構造計算へ向けた基礎研究」, 第 3 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会 (コクヨホール, 東京, 2016 年 10 月 21 日).
14. 山崎剛, 石川健一, 藏増嘉伸, 宇川彰 for PACS Collaboration, 「大きなクォーク質量での軽原子核直接計算の演算子依存性の研究」, 日本物理学会第 72 回年次大会 (大阪大学豊中キャンパス, 大阪, 2017 年 3 月 17 日-20 日).
15. 賀数淳平, 石川健一, 石塚成人, 藏増嘉伸, 中村宜文, 滑川裕介, 谷口裕介, 浮田尚哉, 山崎剛, 吉江友照 for PACS Collaboration, 「Strange mass reweighting を考慮した物理点質量近傍での格子 QCD による  $\pi$  中間子形状因子の研究」, 日本物理学会第 72 回年次大会 (大阪大学豊中キャンパス, 大阪, 2017 年 3 月 17 日-20 日).
16. 吉江友照, 「HEPnet-J/sc 報告」, 2016 年度 HEPnet-J ユーザー会 (新潟大学, 新潟, 2017 年 3 月 27-28 日).

#### (4) 著書、解説記事等

### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 計算基礎科学連携拠点  
<http://www.jicfus.jp/jp/>
2. 理化学研究所計算科学研究機構 (AICS)  
<http://www.aics.riken.jp/>

3. International Lattice Data Grid (ILDG)

<http://ildg.sasr.edu.au/Plone>

4. Japan Lattice Data Grid (JLDG)

<http://www.jldg.org/jldg/>, <http://ws.jldg.org/QCDArchive/index.jsp> □

**8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績**

1. 筑波大学計算科学研究センター主催,  
Advanced Summer School on Lattice Gauge Theories,  
2016 年 9 月 12-14 日, 筑波大学計算科学研究センター, つくば.
2. 日本物理学会第 72 回年次大会シンポジウム(世話人:川島直輝・藏増嘉伸),  
テンソルネットワーク法とその可能性,  
2017 年 3 月 18 日, 大阪大学豊中キャンパス, 大阪.

**9. 管理・運営**

1. 藏増嘉伸、運営委員会委員、運営協議会委員
2. 吉江友照、共同研究運用委員会委員
3. 吉江友照、藏増嘉伸、計算機システム運用委員会委員

**10. 社会貢献・国際貢献**

**11. その他**



## II. 宇宙物理研究部門

### 1. メンバー

教授	梅村 雅之
教授	相川 祐理
准教授	森 正夫
講師	吉川 耕司
助教	古家 健次
助教	Wagner, Alexander (国際テニユアトラック)
研究員	安部 牧人 (CREST)
	高水 裕一 (CCS)
	田中 賢 (ポスト京重点課題 9)
	三木 洋平 (CREST)
	道越 秀吾 (CCS)
学生	大学院生 16 名, 学類生 2 名

### 2. 概要

本年度、当グループは、数値シミュレーションによる研究として、3次元輻射流体力学による球状星団形成の研究、高密度ガス中のブラックホール合体過程の研究、Cold dark matter halo における cusp-core 問題、アンドロメダ銀河のステラーハロー形成過程、重元素の超微細構造線を使った銀河間物質の観測可能性、Vlasov-Poisson シミュレーションによる大規模構造における有質量ニュートリノの影響の研究、活動銀河中心核 (AGN: Active Galactic Nuclei) フィードバックの輻射流体シミュレーション、初期宇宙における泡宇宙モデルの研究、原始惑星系円盤の多孔質ダストの力学と重力不安定、スイング増幅による渦状腕形成の物理機構、ケンタウルス族カリクローの実スケール大域シミュレーション、原始惑星系円盤乱流中のダスト成長と微惑星形成の研究、原始惑星系円盤形成期の分子組成進化、原始惑星系円盤内での重水素濃縮反応、分子雲コアから原始惑星系円盤への水の輸送過程、分子雲における重水素分別および窒素同位体分別過程の研究、を行った。宇宙・生命分野間連携として、星間ダストにおけるアミノ酸生成、惑星大気多重散乱を扱う輻射輸送モデルを用いた生命の痕跡の示唆の研究を進めた。また、数理物質融合科学センターの「宇宙史国際研究拠点」と連携し、宇宙の構造の起源、力と物質の起源、時空の起源、物質と質量の起源に関する研究を協働して推進する体制を構築した。新たな計算コード開発としては、再結合放射を考慮した輻射流体シミュレーションコードの開発、高次精度移流スキームの開発、GPU を用いた重力多体計算コード GOTHIC の開発、銀河の多成分力学平衡分布生成コード MAGI の開発、回転するブラックホール時空での一般相対論的輻射輸送シミュレーションコード

ARTIST の開発, SPH 粒子データを直接用いた Lyman alpha 光子輻射輸送計算コード SEURAT の開発を行った。

### 3. 研究成果

#### 【1】 3次元輻射流体力学による球状星団形成の研究

球状星団は、宇宙初期に形成されたと考えられ、高い速度分散を持つコンパクトな天体である。最近の観測から、宇宙は赤方偏移  $z > 6$  で電離していることが分かっており、大部分の球状星団が形成された時期には強い電離光源が存在していたと考えることができる。紫外線は、光電離・光加熱過程によってガスの重力成長を妨げ、さらに初期宇宙で重要な冷却剤である水素分子の形成を阻害する。我々は、先行研究で 1 次元球対称の輻射流体計算を行い (Hasegawa & Umemura 2009), ガス雲の収縮と紫外線輻射輸送を同時に解くことで、紫外線過熱を受けながら超音速で収縮するガス雲がコンパクトな星団形成につながることを示した。しかし、背景紫外線輻射場中の天体形成で重要となる自己遮蔽効果はガス密度の 2 乗平均に依存し、ガス雲の 3 次元的な非一様性に影響される。また背景輻射場が非等方的な場合は遮蔽領域も非等方的になる。そこで我々は、非一様密度構造を持つ  $10^{6-7} M_{\odot}$  ( $M_{\odot}$  は太陽質量) の低質量ガス雲を生成し、ガスの自己重力流体力学 (SPH 法), 分子の非平衡化学反応, 輻射輸送, ダークマターの重力を同時に解く 3 次元の輻射流体力学計算によって、等方輻射場・片側照射中でのガス雲の収縮過程、自己遮蔽に至る過程を正確に解いた。更に紫外線を遮蔽し十分冷却したガス粒子を星粒子とみなし、重力多体計算をすることで形成された星団のダイナミクスを評価した。その結果、星形成の大半は輻射場の非等方性にあまりよらずに系の中心から  $\sim 10$  pc 程度のコンパクトな領域で行われることが分かった。また、星粒子の運動を追跡した結果、電離ガスの超音速落下によって形成される星団は、半質量半径, mass-to-light ratio, 速度分散-光度関係それぞれが球状星団の観測と矛盾しないコンパクトな星団となることが示された (Abe, Umemura, Hasegawa, 2016)。

#### 【2】 高密度ガス中の力学的摩擦によるブラックホール合体過程の研究

銀河中心には  $10^6 \sim 10^9 M_{\odot}$  を持つ超巨大ブラックホール (BH) が存在すると考えられているが、その質量獲得過程や形成過程は未だに解明されていない。その種として初代天体起源の BH が考えられているが、これまでそれらの BH が合体する条件は明らかにされてこなかった。我々は、一般相対論効果を入れたポストニュートニアン N 体計算によって、高密度ガスによる力学的摩擦を考慮して、 $30 M_{\odot}$  と  $10^4 M_{\odot}$  の 10 体の BH の合体過程のシミュレーションを行った。その結果、高密度ガス内での力学的摩擦の効果を取り入れると、100 Myr で 10 個全ての BH が合体できるパラメータがあることを示した (Tagawa, Umemura, et al. 2015)。さらに、この研究を発展させ、ガス降着を伴う  $30 M_{\odot}$  BH 多体系の計算を行った。

2016 年になって、LIGO によって重力波の直接検出が報告され (GW150914) , この重力波は  $36^{+5.4}_{-4.4} M_{\odot}$  と  $29^{+4.4}_{-4.4} M_{\odot}$  のブラックホールの合体によって放出されたものであることが示された。これは、我々が想定したブラックホール質量に極めて近く、シミュレーションと突き合わせたところ、GW150914 イベントのブラックホール合体が起きるのは、密度が  $10^6 \text{cm}^{-3}$  以上のガスの中で 3 体相互作用が起きる場合であること、また合体が起こるまでに数  $M_{\odot}$  のガス降着があることがわかった (Tagawa, Umemura, Gouda, 2016) 。さらにこの研究を発展させ、BH と中性子星の合体条件を求めた (Tagawa & Umemura, 2017) 。

### 【3】 Cold dark matter halo における cusp-core 問題

現在の標準的な構造形成理論である cold dark matter (CDM) モデルは宇宙の大規模構造の統計的性質を説明することに成功した反面、1Mpc 以下の小さなスケールの構造においていくつかの問題が指摘されている。Dark matter halo (DMH) の中心質量密度は CDM 理論では、発散する cusp 構造を预言するが、観測的には中心質量密度が一定となる core 構造が多数発見されている。また、質量の中心集中度が高い DMH を持つ大質量衛星銀河が見つからない (Too-big-to-fail 問題) 等がある。本研究ではこれら二つの問題を、DMH とバリオンの力学的相互作用に起因した DMH の中心密度分布の進化過程に関わる問題として捉えて解析を行っている。活発な星形成活動が発生する以前の原始銀河の DMH は cusp 構造を持っているが、銀河形成期に発生する周期的な超新星爆発フィードバックによって core 構造へと遷移する、cusp-core 遷移過程の解析を行っている。本年度は特に、ガスの振動がランダウ共鳴を介してダークマターハローの中心部分を加熱する加熱効率について詳細な線形解析及び N 体シミュレーションによる非線形解析を行った。その結果、振動の高波長モードが予想より高いエネルギー輸送効率を示すことを見出し、共鳴半径より内側の領域においても十分な加熱が起こることが分かった。

### 【4】 アンドロメダ銀河のステラーハロー形成過程

近年、ハッブル宇宙望遠鏡やすばる望遠鏡に代表される大型望遠鏡を最大限活用した近傍宇宙の大規模探索により、現在も続く銀河進化の過程を垣間見ることができるようになってきた。近傍のアンドロメダ銀河においては、おびただしい数の暗い矮小銀河が発見されるとともに、それら矮小銀河の衝突によるものと思われるステラーストリームやステラーシェル、あるいは銀河円盤上で見られるリング構造等、銀河衝突の痕跡が続々と明らかにされてきている。本研究では、銀河衝突の重力多体計算及び流体力学計算による銀河衝突過程のみならず、アンドロメダ銀河に付随するダークマターハローの構造や、銀河円盤の構造、銀河ハロー中を徘徊するブラックホールの存在可能性について議論している。本年度は、アンドロメダ・ジャイアント・ストリーム及びノースウェスト・ストリームについて大規模な数値シミ

ュレーションを行い、幅広いパラメータサーベイを行って、その母銀河の性質とその生成過程について制限をつけることに成功した。

#### 【5】 重元素の超微細構造線を使った銀河間物質の観測可能性

宇宙のバリオンのエネルギー密度は宇宙全体の 5%程度であることが、宇宙背景放射 (CMB: Cosmic Microwave Background) や遠方クエーサーの吸収線系の観測からわかっているが、現在の宇宙において実際に観測的に存在が同定されているバリオンは、銀河内の中性ガス・分子ガス・銀河団内の高温プラズマガスなどを足し合わせても、全宇宙のエネルギー密度の 5%と比較して有意に少ないことが知られており、ミッシングバリオン問題・ダークバリオン問題と呼ばれている。数値シミュレーションによる研究では、現在の宇宙のバリオンの半分程度は宇宙大規模構造のフィラメントや銀河・銀河団の外縁部に希薄な高温 ( $10^5\text{K} \sim 10^7\text{K}$ ) ガスとして存在していると考えられており、Warm-Hot Intergalactic Medium (WHIM) と呼ばれている。この WHIM の観測的な検出を目指して、これまで軟 X 線・紫外線領域での重元素の輝線や吸収線の観測が行われてきた。我々は、重元素の超微細構造線での WHIM の検出可能性について調査した。超微細構造線を持つ元素の中で、Hydrogen-like または Lithium-like の窒素イオンが WHIM の観測には適していることを明らかにし、Green Bank Telescope 程度の電波望遠鏡で明るいクエーサーを背景光源とした吸収線系中に、WHIM 中の窒素イオンの超微細構造線が吸収線として検出可能であることを示した。

#### 【6】 Vlasov—Poisson シミュレーションによる大規模構造における有質量ニュートリノの影響の研究

宇宙大規模構造シミュレーションにおいて、有質量ニュートリノの効果を入れることが本研究の目的である。近年、スーパーカミオカンデによるニュートリノ振動の発見などによりニュートリノにも質量があることが示されており、また、宇宙初期のビッグバン直後に大量のニュートリノが生成されることがわかっている。有質量ニュートリノは、宇宙の構造形成においてコールドダークマターに比べて絶対質量は少ないながらも重力源として働くため、無視することはできない。しかしながら、ニュートリノの質量は非常に小さく、速度分散が大きい従来宇宙論的計算で行われている N 体シミュレーションでは、無衝突減衰の扱いが難しく、物理量にショットノイズが混在するなど数値的にニュートリノを計算することが困難であった。そこで我々のグループではそのような問題が原理的に発生しない Vlasov 方程式を元に、高次精度宇宙論的 Vlasov-Poisson シミュレーションコードを開発し、有質量ニュートリノが及ぼす影響の計算を行った。この手法は速度分散が大きい有質量ニュートリノは Vlasov-Poisson シミュレーションで計算し、速度分散が非常に小さいコールドダークマタ

一は N 体シミュレーションで計算するハイブリッド計算である。二つの手法を組み合わせることにより、N 体シミュレーションの高解像度を維持しつつ、ニュートリノの無衝突減衰を考慮した計算が可能となる。計算の結果、有質量ニュートリノがある場合は無衝突減衰により、細かい密度構造がかき消され、ボイド領域にもある程度質量が供給されることがわかった。密度パワースペクトルを見ると、線形理論では再現できない振る舞いが小スケールで起こることがわかった。将来的には観測結果と比較し、より正確なニュートリノの質量を宇宙論の立場から決定することを目指す。

### 【7】 Radiation-hydrodynamical Simulations of AGN Feedback

We performed radiation-hydrodynamical simulations of radiation-driven winds in high-redshift, gas-rich galaxies. The simulation setup was idealised to test maximal coupling of radiation in a multi-phase interstellar medium. Radiative transfer was solved with the M1 scheme for 5 photon groups spanning from infrared to UV and we used a sub-grid treatment for infrared scattering on dust. We found that the mechanical advantage of the outflow generated by the radiation can reach  $L/c \sim 20$ , as seen in many recent observations by Maiolino, Ciccone et al. (2016). The outflows evolved according to optical depth of the photon groups and depended strongly on the properties of the interstellar medium. We found that all photon groups played an important role in the momentum transfer, but that the principal agent that generates the large mechanical advantage was the multiply-scattering infrared photons.

### 【8】 初期宇宙における泡宇宙モデルの研究

「宇宙史国際研究拠点」として、初期宇宙における泡宇宙モデルの考察を行った。これは重力定数、宇宙項が泡宇宙それぞれで異なる宇宙モデルである。重力と結合するスカラー場が実質的な重力定数となるので、その真空相転移により、様々な物理定数を取る宇宙が再現されるモデルとなっている。自然界には、様々な物理定数と呼ばれる基礎定数が存在し、重力や電磁気、強、弱の全ての力の大きさを決定している。例えば、宇宙生成時に、これらの物理定数がランダムな値を取る機構が存在し、ある領域において我々の定数に近い値を取った場合にだけ、似たような宇宙の構造形成、元素や分子、さらには生物の発生が許されると考えたとき、その他の領域(宇宙)では、例えば銀河などの構造ができず、そこにはある種の観測者がいない状況になるので、そもそもそのような宇宙を我々は観測し得ない(人間原理)。宇宙の進化と、そこに付随する異なる物理定数の系という世界観は、様々な真空期待値が存在する超弦理論的宇宙観においても重要となる。

本研究で得られた成果として、重力定数の異なる泡宇宙モデルの研究に進展があった。泡宇宙モデルとして、泡の内（我々の宇宙）と外で重力定数が異なっているものを考える。これを実現するために、スカラー場がアインシュタイン曲率と結合したジョルダン－ブランスディッケ理論を用いた。この際、内と外の時空を分けるスカラー場が泡の壁をつくり、これが内外の時空の膨張則の影響により広がる。解析ではまずこの泡の壁の軌跡がどのようなか調べた。さらに内側の宇宙での初期密度揺らぎはこの壁に反射されるモードと、外宇宙からの透過モードの総和によって、通常のBunch-Davis真空モードから変更を受ける。とくに外宇宙からの透過モードは、より短波長側への揺らぎの大きな変更を与える。これらの研究成果に基づき、2016年10月に開催された国際会議 第26回「一般相対論と重力」研究会（大阪市立大学にて開催）で口頭発表を行った。また12月に筑波大学で行われた宇宙史サロンでも講演を行った。

#### 【9】 原始惑星系円盤の多孔質ダストの力学と重力不安定

惑星形成の初期段階において氷ダストの付着成長により非常に物質密度の低い多孔質ダストが形成されることが近年指摘されている。多孔質ダストの成長が効率的であるため、ダストの落下問題を回避しながら成長を続け、付着成長により微惑星が形成される可能性がある（Okuzumi et al. 2012, Kataoka et al. 2013）。しかし、このような多孔質ダストが乱流中においてどのような力学的な性質をもつのか詳しく検討されていなかった。そこで、乱流やダスト間の重力や衝突などを考慮してダストのランダム速度の時間発展方程式を導いた。そして、その定常解を求めてダストのランダム速度から重力不安定の指標である Toomre の  $Q$  値を計算した。その結果、乱流が強くなければ、付着成長により微惑星が形成される前に重力不安定が発生することがわかった。重力不安定が発生した場合、微惑星形成が飛躍的に加速される可能性がある。重力不安定が発生するための乱流の強さを円盤の強さの関数として解析的に導いた。その結果、標準的に考えられる妥当なパラメータ範囲において重力不安定が発生することがわかった。

#### 【10】 スイング増幅による渦状腕形成の物理機構

原始惑星系円盤、土星の環、銀河円盤など様々なスケールの円盤で渦状腕が見られるが、それらの起源を説明するメカニズムの1つにスイング増幅がある。これは、円盤中の密度パターンが速度シアによってリーディングからトレーリングに回転していく際に、自己重力の影響で密度振幅が飛躍的に増幅する現象である。Julian and Toomre (1966) や Toomre (1981) などの研究においてその物理機構の存在は示されていたが、このメカニズムにより具体的にどのような性質の渦状腕が形成されるか調べられていなかった。そこで、まず Julian and Toomre (1966) による無衝突ボルツマン方程式を基にした理論モデルを用いて、スイン

グ増幅で形成される腕の波長やピッチ角、密度などのパラメータ依存性を検討し、フィッティング公式を導いた。そして、それらが無衝突系の N 体シミュレーションで検証したところ非常によく一致することがわかった。このことから無衝突系の N 体シミュレーションで形成された腕は確かにスイング増幅によって形成されているといえる。次に、スイング増幅の物理的理解を深めるために Toomre (1981) の理論モデルを再検討した。その結果、Toomre (1981) の理論モデルはシアレイトが大きい場合に数値的取扱いが破綻することがわかったため、修正された理論モデルを提案した。それを用いてスイング増幅中の粒子のエピサイクル振動の位相を調べた。すると増幅前に異なる位相を持っていた粒子が増幅中に位相が揃うことがわかった。このことから、スイング増幅の物理的解釈を与えた。

### 【11】 ケンタウルス族カリクローの実スケール大域シミュレーション

2014 年にケンタウルス族の小惑星カリクローで環が発見された。その光学的厚さは土星の環に匹敵するほど高く非常に高密度の環であると考えられる。しかし、その起源や構造、進化についてはまだ検討されていない。そこで、小惑星カリクローの環の N 体シミュレーションを行った。従来の土星の環のシミュレーションではシアリングボックスによる局所近似か非現実的な大きな粒子を用いるなど現実とは異なるシミュレーションとなっていたが、カリクローの系の小ささのため実スケール大域シミュレーションが可能となった。シミュレーションの結果、粒子密度がカリクロー本体の密度の 50% 以上の場合、環が分裂することがわかった。このことから環の粒子とカリクロー本体の物質組成が異なることがわかる。しかし、粒子密度がカリクロー本体の密度の 50% 以下の場合でもウェイク構造とよばれる微細構造が形成されることがわかった。この構造は環の拡散を飛躍的に早め、およそ 1 年から 100 年程度で環は拡散するという見積もりになる。もしカリクローの環が巨大惑星との近接遭遇の起きた 1000 万年前に形成されたとする、環を長持ちさせるメカニズムが必要である。近傍に衛星がある場合は環の拡散が抑えられることから、環の近傍には未発見の衛星が存在する可能性がある。

### 【12】 原始惑星系円盤乱流中のダスト成長と微惑星形成の研究

原始惑星系円盤のガス乱流中のダストは円盤内で衝突・合体を繰り返して成長し、km サイズの微惑星、そして惑星が形成されると考えられている。しかし、その過程には微惑星形成を妨げる障壁（中心星への落下問題や衝突破壊問題など）が存在し未解決である。障壁の一つである衝突破壊問題は、岩石ダストが高速衝突するため合体できずに破壊してしまい、成長できないというものである。微惑星形成過程の衝突破壊問題の解決のためには、 $St = \tau_p/T = 10^{-3} \sim 1$  ( $\tau_p$ : 粒子の制動時間,  $T$ : 乱流中の最大渦の時間スケール) のダストの乱流中の衝突速度や衝突頻度の正確な評価が必要である。近年、Pan et al. (2015) は圧縮性流体の近似

計算を用いて、乱流中のダストの衝突速度等の評価を行い、惑星科学分野で従来採用されている Völk-type モデルの検証を行った。結果は、中間サイズ( $Re^{-1/2} < St < 1$ ) で、Völk-type モデルの予測が衝突速度を若干過大評価 (2 倍程度) するというものであった (ここで  $Re$  はレイノルズ数)。しかし、Pan らの計算は  $Re = 10^3$  相当の近似計算で慣性領域も狭いため、正確な検証ができていない保証はない。そこで本研究では、非圧縮ナビエ・ストークス方程式の大規模な直接数値計算 (DNS) を用いて、慣性領域がより広い高解像度な乱流場 ( $Re > 10^4$ ) 中で粒子追跡を行い、 $St \approx 0.01 \sim 0.1$  のダストの衝突速度などの評価を行い、それらの  $Re$  数依存性を調べた。DNS では、 $St \approx 0.01 \sim 0.1$  の粒子間の相対速度、衝突速度、衝突頻度因子 (相対速度と動径分布関数の積) が Pan らの結果と比較してどれも大きくなるという結果を得た。また、 $Re$  が大きいほど衝突頻度因子が大きくなる傾向があった。動径相対速度の確率分布関数 (PDF: Probability Distribution Function) は  $St$  が大きいほど裾野が広がるが、衝突限界速度以下の粒子も多く存在していることも確認できた。

さらに、限界付着速度条件 (Wada et al, 2013) などを考慮に入れた、簡易な衝突付着成長モデルを導入することにより、岩石ダストを想定した乱流中での慣性粒子の成長の数値実験を行った。その結果、ある密集領域に存在する慣性粒子が、周りの慣性粒子を巻き込み、局所的かつ急激に成長すること、また一旦急激に成長した粒子は、その後成長が緩やかになることが分かった。

### 【13】 原始惑星系円盤形成期の分子組成進化

理論モデルによると原始惑星系円盤と星は同時に形成される。しかし円盤の形成と成長は磁場とガスの相互作用に依存することも指摘されており、Class 0-I 程度の若い原始星での円盤形成過程の観測は現在盛んに行われている。また円盤形成期はエンベロープからの質量降着などによって比較的高温になり、星間物質から惑星物質への物質進化においても重要な段階であると考えられる。そこで、我々は Tsukamoto et al. (2015) による円盤形成の輻射流体モデルを用いて、円盤形成時のガスと氷の組成進化のシミュレーションを行った。その結果、 $H_2O$ ,  $CH_4$ ,  $NH_3$ ,  $CH_3OH$  など分子雲ですでに存在量の高い安定分子はそのまま円盤に取り込まれるが、炭化水素や大型有機分子は形成期の円盤内で多く生成されることが分かった。硫黄はコアの収縮段階では  $H_2S$  として多く存在するが、円盤内では壊され、 $SO$ ,  $H_2CS$  などに変化することを示した。また ALMA での原始星コアや原始惑星系円盤の観測に共同研究者として加わり、理論モデルと観測結果の比較を行った。

### 【14】 原始惑星系円盤内での重水素濃縮反応

彗星・隕石などの太陽系資源物質や地球の水は重水素／水素比が元素存在度( $10^{-5}$ )よりも高い。これは重水素濃縮と呼ばれ、低温での化学反応に由来すると考えられている。水素を重



水素で置換された分子はもとの分子よりもゼロ点エネルギーが高く、低温下ではいくつかの交換反応によって重水素濃縮が起こるのである。濃縮が起こる場としては分子雲のほかには原始惑星系円盤が考えられる。近年円盤を  $\text{DCO}^+$  などの重水素化分子の輝線で空間分解観測することが可能となった。その結果、重水素化分子が従来の予想よりも円盤の内側まで分布していることや分布が円盤毎に異なることもわかった。我々は円盤内での重水素化分子の存在量を数値計算で調べ、円盤では分子雲での主要反応とは異なる重水素化反応が効くこと等を明らかにした。

### 【15】 分子雲コアから原始惑星系円盤への水の輸送過程

太陽系内の水が持つ著しい特徴として重水素(D)に富むことが挙げられる。この事実は、太陽系の水が極めて低温な環境下(せいぜい数十ケルビン以下)で生成されたことを意味する。具体的な水の生成の場として、原始太陽系の母体となった分子雲コア、あるいは原始太陽系星雲外縁部の2つが考えられているが、未だ活発に議論が行われている。もし前者であれば、原始太陽系物質は母体分子雲コアの情報を保持していることになる。後者であれば、原始太陽系星雲において大規模に分子組成がリセットされたことになる。そのため両者の区別は、原始太陽系の物質進化を理解する上で重要である。

我々は、分子雲コアの自己重力収縮による円盤形成の2次元軸対称モデルと化学反応ネットワークモデルを用いて、形成される円盤にどの程度分子雲コア起源の水が含まれるかを調べた。円盤への輸送過程において、一部の水は中心星からの紫外線により破壊されるが、円盤に含まれる水の大部分(>50%)は分子雲コア起源であることが分かった。この結果は、彗星中の $\text{D}_2\text{O}$ 、 $\text{HDO}$ 、 $\text{H}_2\text{O}$ を観測することで検証可能であることを示した。

### 【16】 分子雲における重水素分別および窒素同位体分別過程の研究

隕石や彗星などの原始太陽系始原物質の起源を探るうえで、安定同位体は強力な研究手段である。隕石中には重水素(D)と $^{15}\text{N}$ に富んだ同位体的ホットスポットが存在する。個々のホットスポットにおいて、有機分子中のDと $^{15}\text{N}$ の濃集の程度は必ずしも相関していない。Dと $^{15}\text{N}$ の濃集が、いずれも低温環境下でのイオン-分子反応に起因するならば、この非相関は説明できない。近年、 $^{15}\text{N}$ の濃集に窒素分子( $\text{N}_2$ )の同位体選択的光解離が重要である可能性が指摘されている。そこで我々は、低温下でのイオン-分子反応と $\text{N}_2$ の同位体選択的光解離を考慮した反応ネットワークモデルを構築し、分子雲におけるDと $^{15}\text{N}$ の同位体分別過程を整合的かつ定量的に調べた。その結果、Dの濃集はイオン-分子反応、 $^{15}\text{N}$ の濃集は $\text{N}_2$ の同位体選択的光解離で主に引き起こされることが分かった。 $\text{NH}_3$ や $\text{HCN}$ などの分子においてDと $^{15}\text{N}$ の濃集の程度は相関しないことを示した。この結果は太陽系始原物質の分子雲起源説を支持する。

**【17】 星間ダストにおけるアミノ酸生成**

地球上の生命の起源はいまだに明らかにされていないが、これまで生命の起源は原始地球での化学進化であるとする説が有力視されてきた。しかしながら、1969 年オーストラリアに落下した Murchison 隕石からアミノ酸が検出され、生命は宇宙から飛来した物質を起源と考える「宇宙起源説」が浮上した。さらに Murchison 隕石以外の炭素質コンドライトからもアミノ酸が検出され、2009 年には NASA の探査機スターダストにより彗星の塵からアミノ酸の一つであるグリシンが見つかった。2010 年には、1200~1300 K の高温環境を経験した Almahata sitta 隕石からアミノ酸が検出され、非常に高温の小惑星が冷える過程で生じる反応でアミノ酸が生成される可能性のあることがわかった。さらに 2016 年には欧州の彗星探査衛星ロゼッタによって、火星と木星の間にある 67P/チュリュモフ・ゲラシメンコ彗星でグリシンが検出された。我々は、宇宙由来のアミノ酸がどのように生成される可能性があるのか明らかにすることを目的に、分子雲から見つかっている分子から隕石や分子雲から検出された前駆体を経由するグリシン生成経路について、量子化学計算(密度汎関数理論)を用い詳細な反応機構を求めた。アミノ酸前駆体としては、Murchison 隕石から検出されたヒダントインと分子雲から検出されたアミノアセトニトリルに注目した。ヒダントインとアミノアセトニトリルは加水分解によりグリシンとなる。まず、すでに判明している実験室系での生成過程に対し、反応物及び中間体の生成エネルギーから安定性を評価し、低密度かつ低温の宇宙環境で反応が起こりうるか検討した。さらに反応経路中の各反応の気相反応の遷移状態探索を行い、反応のエネルギー障壁を求めた。さらに、氷で覆われた星間ダスト表面での反応を模擬するために、水分子による触媒反応を考慮した遷移状態探索を行った。その結果、生成エネルギーの評価よりアミノ酸はほとんど発熱反応で生成されることがわかった。次に、各反応の遷移状態探索を行った結果、真空中では最大で 70 kcal/mol 程度の反応障壁が見つかった。水分子による触媒反応では最大 55 kcal/mol 程度と反応障壁が低くなった。よって、分子雲中に豊富な水は触媒として重要であることがわかった。しかしながら現実的には、50~70 kcal/mol ほど反応障壁があると低温の分子雲のタイムスケールでは反応が起きない。ヒダントインが隕石から検出されていることから、隕石母天体でアミノ酸生成が起きる可能性もある。そこで、惑星形成時の天体衝突による  $T \sim 10^3$  K 程度の温度上昇を仮定すると、70 kcal/mol 程度の反応障壁でも超えることができる。また、分子雲のような低温環境での反応障壁の上限は約 12 kcal/mol 程度であった。水分子の触媒効果だけではなく、反応場としての氷の効果を考慮すると、より一層反応障壁が低下し反応が進む可能性もある。近傍での星形成があれば、紫外線による光化学反応を含む反応経路によるアミノ酸生成も考えられる。

**【18】 惑星大気の多重散乱を扱う輻射輸送モデルを用いた生命の痕跡の示唆**

系外惑星の観測が進み、地球以外の惑星にも生命が存在する可能性が示唆され、その探査に興味を持たれるようになった。唯一生命の存在が確認されている地球をもとに、大気分子や植生などが生命の痕跡である“バイオマーカー”として挙げられており、系外惑星において分光によるそれらの検出可能性が調べられている。本研究では、バイオマーカーの検出可能性について定量的な解析を行った。系外惑星の観測状況を模擬したモデルを作成し、地球型惑星において、輻射輸送計算によってバイオマーカーとなる大気分子や地表面の環境の観測予測をして評価した。地表面の環境の特定において、近赤外域では海、短波長側では雪・氷の地表面で、その他の環境との違いが見られた。ハビタブルな惑星の興味である植生の環境において、レッドエッジに相当する、 $0.67\mu\text{m}$  と  $0.72\mu\text{m}$  あたりの波長域は、その特徴よりも  $\text{O}_2$ 、 $\text{O}_3$  の吸収の寄与の方が勝っていた。紫外域( $\sim 0.35\mu\text{m}$ ) は、大気中の分子のうち、 $\text{O}_2$  の吸収がほとんどである。これらの見積もりは、将来の観測計画を立てる際に重要であり、本研究の結果は、紫外域の観測が行われれば、散乱と  $\text{O}_2$  と  $\text{O}_3$  の量とを結びつけて議論できることを示している。

#### 【19】 再結合放射を考慮した輻射流体シミュレーションコードの開発

輻射輸送シミュレーションやそれを流体力学シミュレーションとカップルさせた輻射流体シミュレーションは、天体形成の数値シミュレーションで多く用いられるようになってきたが、電離領域からの再結合放射などの空間的に広がった光源からの輻射輸送は計算コストが膨大であるため、これまでは無視されることが多かった。我々は、輻射輸送計算を GPU やマルチコア・メニーコアアーキテクチャに基づくプロセッサで効率的に実行するアルゴリズムを開発し実装した。このコードは、点源からの輻射輸送を解く ARGOT 法と再結合放射などの広がった領域からの輻射輸送を解く ART 法を GPU やマルチコアプロセッサにおいて実装したものである。このコードを使い、自己重力と圧力の釣り合った等温平衡球であるポナー・エバート球に一樣平行光線を入射した結果、平行光線の輻射強度と球の質量に依るが、再結合放射を考慮した計算では考慮していないものに比べ、比較的早い段階で構造が壊される傾向にあることがわかった。これは、高密度の電離水素領域が形成され、そこが新たな再結合放射源として振る舞い、再結合放射がない場合に比べ加熱されるためである。

#### 【20】 高次精度移流スキームの開発

Vlasov 方程式を直接数値シミュレーションする Vlasov シミュレーションでは 6 次元位相空間を離散化してメモリに載せるため、一般的に大量の記憶容量が必要となり、数値シミュレーションの分解能を向上させるためにメッシュ数を増やすことは現実的ではない。そこで、メッシュ数を増やすかわりに、計算スキームの空間精度を向上させることで Vlasov シミュレーションの高精度化を達成することが必要である。Vlasov シミュレーションでは、位相空間

の各次元方向に 6 本の移流方程式を時間発展させるため、空間高次精度の移流スキームを開発することが必要となる。また、Vlasov 方程式の物理的な要請として、数値解の単調性・正值性を保証することが重要である。このような背景をもとに、我々は、空間 5 次精度及び 7 次精度で単調性・正值性を保証する高次精度移流スキームを開発した。また、時間発展スキームについても従来から使われている TVD-Runge-Kutta スキームだけではなく、より計算コストが小さく高精度の semi-Lagrange スキームも採用することで、より Vlasov シミュレーションに適した移流スキームを開発した。

## 【21】 GPU を用いた重力多体計算コード GOTHIC の開発

宇宙物理学の研究で広く用いられている重力多体計算に用いるための Tree コード (GOTHIC: Gravitational Oct-Tree code accelerated by Hierarchy time step Controlling) を実装し、GPU を用いて高速化した。GOTHIC の実装に当たっては、block time step を採用することで全体の計算量を削減し、また複数の関数の実行時間を監視しながら動的な最適化を施すという自動最適化も実装した。特に自動最適化の採用により、粒子分布の時間発展に応じて実行構成が自動的に更新されていくため、実際の宇宙物理学の研究に適用しやすい実装となっている。Fermi, Kepler, Maxwell 世代を代表する GPU を用いて性能評価を行った結果、先行研究でも採用されている一般的な実装に比べて 5-10 倍程度の高速化が確認できた。特に高速化の効果が大きかったのは block time step の採用であり、一般的に採用されている shared time step と比較して 3-5 倍程度の高速化が達成できた。上記の成果は学術論文誌 New Astronomy 誌に採録済みである (Miki & Umemura 2017)。

## 【22】 銀河の多成分力学平衡分布生成コード MAGI の開発

銀河どうしの衝突・合体や銀河円盤中の渦状腕の形成などの力学進化過程を詳細に調べるために、N 体シミュレーションを用いた研究が精力的に進められている。こうした計算を行うためには適切な初期条件を生成する必要がある。しかしながら、一般に銀河はバルジ・ハロー・円盤からなる多成分系であり、これを力学平衡状態にある粒子分布として表現することは容易ではなく、現在も初期条件の生成方法に関する研究が続けられている。また、天の川銀河のような円盤銀河では厚さの異なる複数の円盤成分が見つかることが多いため、複数成分の円盤モデルを生成することが望ましい。さらに、銀河の質量やサイズ、各成分の質量分布に対する依存性を調べるためには、これらを手軽に変更できることも重要であるが、こうした性質を全て備えた初期条件生成コードは存在しない。また、得られた粒子分布は観測データのフィッティングやガス入りの計算にも利用可能であるが、特にフィッティングに用いるためには手軽に粒子分布を変更できる必要がある。

そこで我々は、複数の球対称成分と軸対称成分を粒子系として表現する初期条件生成コード **MAGI** (**M**ANy-component **G**alaxy **I**nitializer) を開発した。球対称成分については、等方的な速度分布を仮定し **Eddington formula** を用い分布関数を作成、この分布関数に従う粒子分布を生成することで、**Burkert**, **Einasto**, **Hernquist**, **King**, **Moore**, **NFW**, **Plummer model** などの多様なモデルやその重ね合わせを力学平衡状態にある粒子分布として表現できる。また円盤成分については、**potential-density pair** を数値的に解くことでその分布を生成し、厚さの異なる複数の円盤成分の生成にも対応した。生成された粒子分布の長時間の安定性についての数値実験を行ったところ、長時間に渡る安定性も確認できた。また、**MAGI** の公開についても準備を進めた。

### 【23】 回転するブラックホール時空中での一般相対論的輻射輸送シミュレーションコード **ARTIST** の開発

ブラックホール周囲の降着流・噴出流での物理過程を理解するためには、曲がった時空中での輻射輸送の効果を正確に把握する必要がある。輻射の効果は降着流・噴出流の力学的構造や熱力学的構造に重要な影響を与えることがある上に、観測量からブラックホール近傍で起こっている物理過程を明らかにする際には輻射場の相対論効果を無視することができないためである。本研究では、回転するブラックホール時空中での輻射輸送方程式を直接数値計算することで、一般相対論的な光子輻射場を正確に解くことが可能な数値シミュレーション・コード(**ARTIST**)を開発した。この数値コードでは、位相空間中で定義される不変輝度を直接数値計算することで、光子の放射・吸収・散乱の全ての過程を因果律を厳密に保って解くことが可能である。また、**ART** 法の一般化により、測地線に沿った長特性線法を用いて計算しているため、数値的な拡散がない。光学的に厚い状況では光子散乱の効果を無視することができないが、本コードでは光子の運動量空間積分を直接数値計算することで散乱過程の **in-coming** 光子と **out-going** 光子を計算した。また、光学的に薄い状況では光子球の近傍やエルゴ領域内で起こる一般相対論効果を無視することができないが、本コードは過去の一般相対論的レイ・トレーシング計算の結果を全て正確に再現することが可能である。ブラックホール近傍で光が放出される場合には、光子球近傍を回り続ける光子軌道があるために、輻射衝突が起こり続けるが、本コードではこれらの輻射衝突も計算することができることを確認した。

### 【24】 SPH 粒子データを直接用いた **Lyman alpha** 光子輻射輸送計算コード **SEURAT** の開発

**Lyman alpha** 輝線 (**Ly $\alpha$** ) で非常に明るい高赤方偏移銀河 (**Lyman alpha emitters**, **LAEs**) の理論モデル化に向けて、流体力学計算と **Monte Carlo** 法を用いた **Ly $\alpha$**  輝線輻射輸送計算を

組み合わせたシミュレーションが行われてきている。銀河形成シミュレーションの流体計算には、広いダイナミックレンジを取り扱う事ができる SPH 法が広く用いられるが、その一方で従来の Ly $\alpha$  輻射輸送コードは mesh ベースで開発されてきた。そのため、Ly $\alpha$  輻射輸送計算の際に SPH 計算データを mesh へ割り当てる必要があり、高密度領域を高解像度で分解している SPH 計算の情報を人工的に落としてしまうことが問題であった。そこで本研究では、ray-tracing の際の SPH 粒子探索法を工夫することで、SPH 粒子自身を輻射輸送計算の際のグリッドとして用いる meshfree の Ly $\alpha$  輻射輸送計算コード SEURAT を開発した。テスト計算の結果、本コードが一様ガス球からの Ly $\alpha$  光子脱出スペクトル、dusty slab からの Ly $\alpha$  光子脱出確率といった問題の解析解をよく再現することを確認し、さらに密度勾配が非常に大きな系に対しても meshfree で Monte Carlo 計算が可能である事を確かめた。

#### 4. 教育

##### 【学位論文】

###### <博士論文>

1. 五十嵐 朱夏

Transonic analysis of galactic outflows and its application

(銀河風の遷音速解析とその応用)

2. 桐原 崇亘

Numerical study of internal structure of galaxies via minor merger events in M31

(M31 におけるマイナーマージャー現象を用いた銀河の内部構造の数値的研究)

###### <修士論文>

1. 久喜 奈保子

A Radiative Diffusion and Transfer Scheme for Lyman alpha Line Scattering

(ライマン  $\alpha$  ライン散乱の輻射拡散・輸送計算スキーム)

2. 楠 尚久

銀河衝突シミュレーションで探るアンドロメダ銀河のダークマターハロー外縁部構造と衝突軌道の探査

3. 佐々木 さゆり

初期宇宙における構造形成に対するダークマター・バリオン相対速度の影響

4. 柴野 祥平

M31 の銀河進化における星間ガスと恒星風の相互作用

5. 古谷 眸

原始惑星系円盤における圧縮性乱流場中のダスト粒子運動

6. 石原 駿

惑星大気の多重散乱を扱う輻射輸送モデルを用いた生命の痕跡の示唆について

7. 横村 尚子（神戸大学，H27.9-H28.8 筑波大学依託学生）

モンテカルロ法を用いた星間化学の数値計算

< 学士論文 >

1. 福原 葉月

重力波 GW150914: 巨大分子雲における BH 合体の可能性

2. 宮川 銀次郎

Plane of Satellites の力学安定性について

【集中講義】

• 相川祐理

「理論天文学特別講義 I」 （2016 年 7 月 13 日～15 日，東京大学大学院理学系研究科天文学専攻）

5. 受賞，外部資金，知的財産権等

【受賞】

1) 筑波大学 BEST FACULTY MEMBER2016，梅村雅之，2017 年 2 月 20 日

2) 筑波大学 BEST FACULTY MEMBER2016，相川祐理，2017 年 2 月 20 日

【外部資金】

< 代表者 >

■基盤研究（B）（一般）H27 年度～H30 年度：梅村雅之

「一般相対論的輻射流体によるブラックホール超臨界降着流と超大質量星の研究」

（H28 年度 120 万円／全体 540 万円）

■科学技術試験研究委託事業，H28 年度～H32 年度：梅村雅之

「ポスト京で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開

発・研究開発」萌芽的課題，「太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境

変動の解明（生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明）」（サブ課題 D 原

始太陽系における物質進化と生命起源の探求）

(H28 年度 1,250 万円／全体 4,874 万円)

■基盤研究 (C) (一般) H26 年度～H29 年度：森正夫

「輻射流体シミュレーションによる銀河系統樹の構築」

(H28 年度 104 万円／全体 520 万円)

■基盤研究(C) (一般) H23 年度～H28 年度：相川祐理

「星・惑星系形成過程における揮発性物質の組成，同位体比，気相・固相分配」

(H28 年度 150 万円)

■新学術領域「宇宙分子進化」公募研究，H28 年度～H29 年度：相川祐理

「星・惑星系形成過程における気相と固相の化学：天体構造の観測指標と物質進化」

(H28 年度 180 万円)

■挑戦的萌芽研究，H28 年度～H30 年度：相川祐理

「計算科学によるアストロバイオロジーへの理論的挑戦」

(H28 年度 130 万円)

<分担者>

■基盤研究 (A) (一般) H27 年度～H31 年度：梅村雅之（代表者：大内正巳）

「すばる HSC と SDSS で探る宇宙論的スケールの物質循環」 (2.5 万円)

(H28 年度分担金 2.5 万円／分担金全体 12.5 万円)

■基盤研究 (C) (一般) H28 年度～H31 年度：梅村雅之（代表者：高橋労太）

「一般相対論的 ART 法による超巨大ブラックホール形成と成長過程の研究」

(H28 年度分担金 10 万円／分担金全体 20 万円)

■基盤研究 (A) (一般) H27 年度～H31 年度：森正夫（代表者：大内正巳）

「すばる HSC と SDSS で探る宇宙論的スケールの物質循環」

(H28 年度分担金 2.5 万円／分担金全体 12.5 万円)

■戦略的創造研究推進事業 CREST，H24 年度～H29 年度：梅村雅之（代表者：朴泰祐）

「ポストペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発」

(H28 年度分担金 1,700 万円／分担金全体 4,980 万円)

■科学技術試験研究委託事業，H27 年度～H32 年度：吉川耕司（代表者：吉田直紀）



「ポスト京で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」, 重点課題 9 「宇宙の基本法則と進化の解明」 (サブ課題 C 大規模数値計算と広域宇宙観測データの融合による宇宙進化の解明)

(H28 年度分担金 820 万円)

■挑戦的萌芽研究, H28 年度～H30 年度: 古家健次 (代表者: 相川祐理)

「計算科学によるアストロバイオロジーへの理論的挑戦」

(H28 年度分担金 32.5 万円)

## 【知的財産権】

なし

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

- 1) Takahashi, R., Umemura, M., 2017, “General Relativistic Radiative Transfer Code in Rotating Black Hole Spacetime: ARTIST”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 464, 4567-4585
- 2) Tagawa, H., Umemura, M., Gouda, 2016, “Mergers of accreting stellar-mass black holes”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 462, 3812-3822
- 3) Namekata, D., Umemura, M., 2016, “Subparsec-scale dynamics of a dusty gas disk exposed to anisotropic AGN radiation with frequency dependent radiative transfer”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 460, 980-1018
- 4) Abe, M., Umemura, M., Hasegawa, K., 2016, “Formation of globular clusters induced by external ultraviolet radiation II: Three-dimensional radiation hydrodynamics simulations”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 463, 2849-2863
- 5) Momose, R., Ouchi, M., Nakajima, K., Ono, Y., Shibuya, T., Shimasaku, K., Yuma, S., Mori, M., Umemura, M., 2016, “Statistical properties of diffuse Ly $\alpha$  haloes around star-forming galaxies at  $z \sim 2$ ”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 457, 2318-2330
- 6) Miki, Y., Umemura, M., 2017, “GOTHIC: Gravitational oct-tree code accelerated by hierarchical time step controlling”, New Astronomy, 52, 65-81
- 7) Miki, Y., Mori, M., Rich, R.M., 2016, “Collision tomography: Physical properties of possible progenitors of the Andromeda stellar stream”, The Astrophysical Journal, 827, 82, 11 pp

- 8) Kirihaara, T., Miki, Y., Mori, M., Kawaguchi, T., & Rich, R. M. 2017, “Formation of the Andromeda Giant Stream: Asymmetric Structure and Disc Progenitor”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 464 (3): 3509-3525
- 9) Sakai, Nami, Oya, Yoko, López-Sepulcre, Ana, Watanabe, Yoshimasa, Sakai, Takeshi, Hirota, Tomoya, Aikawa, Yuri, Ceccarelli, Cecilia, Lefloch, Bertrand, Caux, Emmanuel, Vastel, Charlotte, Kahane, Claudine, Yamamoto, Satoshi, 2016, “Subarcsecond Analysis of the Infalling-Rotating Envelope around the Class I Protostar IRAS 04365+2535”, *The Astrophysical Journal Letters*, 820, L34, 6 pp
- 10) Walsh, Catherine, Loomis, Ryan A., Öberg, Karin I., Kama, Mihkel, van 't Hoff, Merel L. R., Millar, Tom J., Aikawa, Yuri, Herbst, Eric, Widicus Weaver, Susanna L., Nomura, Hideko, 2016, “First Detection of Gas-phase Methanol in a Protoplanetary Disk”, *The Astrophysical Journal Letters*, 823, L10, 7 pp
- 11) Shimonishi, Takashi, Onaka, Takashi, Kawamura, Akiko, Aikawa, Yuri, 2016, “Detection of a hot molecular core in the Large Magellanic Cloud with ALMA”, *The Astrophysical Journal*, 827, 72, 20 pp
- 12) Walsh, C., Juhasz, A., Meeus, G., Dent, W.R.F., Maud, L., Aikawa, Y., Millar, T.J., Nomura, H., 2016, “ALMA reveals the anatomy of the mm-sized dust and molecular gas in the HD 97048 disk”, *The Astrophysical Journal*, 831, 200, 15 pp
- 13) Nishimura, Y., Shimonishi, T., Watanabe, Y., Sakai, N., Aikawa, Y., Kawamura, A., Yamamoto, S., 2016, “Spectral Line Survey toward a Molecular Cloud in IC10”, *The Astrophysical Journal*, 829, 94, 8 pp
- 14) Imai, M., Sakai, N., Oya, Y., López-Sepulcre, A., Watanabe, Y., Ceccarelli, C., Lefloch, B., Caux, E., Vastel, C., Kahane, C., Sakai, T., Hirota, T., Aikawa, Y., Yamamoto, S., 2016, “Discovery of a Hot Corino in the Bok Globule B335”, *The Astrophysical Journal Letters*, 830, L37, 7 pp
- 15) Yoneda H., Tsukamoto, Y., Furuya, K. & Aikawa, Y. 2016, “Chemistry in a forming protoplanetary disk: main accretion phase”, *The Astrophysical Journal*, 833, 105, 17 pp
- 16) Ziurys, L. M., Halfen, D.T., Geppert, W. & Aikawa, Y., 2016, “Following the Interstellar History of Carbon: From the Interiors of Stars to the Surfaces of Planets”, *Astrobiology*, 16, 997
- 17) Harada, N., Hasegawa, Y., Aikawa, Y., Hirashita, H., Liu, H. B., Hirano, N. 2017, “Effects of Grain Growth on Molecular Abundances in Young Stellar Objects”, *The Astrophysical Journal*, 837, 78, 17 pp
- 18) Oya, Y., Sakai, N., Watanabe, Y., Higuchi, A. E., Hirota, T., López-Sepulcre, A., Sakai, T., Aikawa, Y., Ceccarelli, C., Lefloch, B., Caux, E., Vastel, C., Kahane, C., Yamamoto, S., 2017, “L483: Warm Carbon-chain Chemistry Source Harboring Hot Corino Activity”, *The Astrophysical Journal*, 837, 174, 15 pp

- 19) Michikoshi, S., Kokubo, E., 2017, “Simulating the Smallest Ring World of Chariklo”, *The Astrophysical Journal Letters*, 837, Issue 1, article id. L13, 7 pp
- 20) Huang, J., Oberg, K.I., Qi, C., Aikawa, Y., Andrews, S., Furuya, K., Guzman, V.V., Loomis, R.A., van Dishoeck, E.F., Wilner, D.J., 2017, “An ALMA survey of DCN/H<sup>13</sup>CN and DCO<sup>+</sup>/H<sup>13</sup>CO<sup>+</sup> in protoplanetary disks”, *The Astrophysical Journal*, 835, 231, 29 pp
- 21) Yamauchi, D., Ichiki, K., Kohri, K., Namikawa, T., Oyama, Y., Sekiguchi, T., Shimabukuro, H., Takahashi, K., Takahashi, T., Yokoyama, S., Yoshikawa, K., 2016, “Cosmology with the Square Kilometre Array by SKA-Japan”, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 68, id.R2 19 pp
- 22) Bieri, R., Dubois, Y., Rosdahl, J., Wagner, A. Y., Silk, J., & Mamon, G. A. 2017 “Outflows Driven by Quasars in High-Redshift Galaxies with Radiation Hydrodynamics” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 464, 1854–1873,
- 23) Drozdovskaya, M. N., Walsh, C., van Dishoeck, E. F., Furuya, K., Marboeuf, U., Fakultat, P., Thiabaud, A., Harsono, D., Visser, R., 2016, “Cometary ices in forming protoplanetary disc midplanes”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 462, 977-993
- 24) Michikoshi, S., Kokubo, E., 2016, “Galactic Spiral Arms by Swing Amplification”, *The Astrophysical Journal*, 821, 35
- 25) Michikoshi, S., Kokubo, E., 2016, “Swing Amplification of Galactic Spiral Arms: Phase Synchronization of Stellar Epicycle Motion”, *The Astrophysical Journal*, 823, 121
- 26) Michikoshi, S., Kokubo, E., 2016, “Planetesimal Formation by Gravitational Instability of a Porous-Dust Disk”, *The Astrophysical Journal Letters*, 825, 28
- 27) Michikoshi, S., Kokubo, E., “Dynamics of Porous Dust Aggregates and Gravitational Instability of Their Disk”, *The Astrophysical Journal*, in press
- 28) Mukherjee, D., Bicknell, G. V., Sutherland, R., Wagner, A., 2016, “Relativistic jet feedback in high-redshift galaxies – I. Dynamics,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 461, 1, 967–983
- 29) Furuya, K., Drozdovskaya, M. N., Visser, R., van Dishoeck, E. F., Walsh, C., Harsono, D., Hincelin, U., Taquet, V., 2017, “Water delivery from cores to disks: Deuteration as a probe of the prestellar inheritance of H<sub>2</sub>O”, *Astronomy and Astrophysics*, 599, A40
- 30) Akamatsu, H., Fujita, Y., Akahori, T., Ishisaki, Y., Hayashida, K., Hoshino, A., Mernier, F., Yoshikawa, K., Sato, K., Kaastra, J.S. “Properties of the cosmological filament between two clusters: A possible detection of a large-scale accretion shock by Suzaku”, *Astronomy & Astrophysics*, in press
- 31) Kitayama, T., Ueda, S., Takakuwa, S., Tsutsumi, T., Komatsu, E., Akahori, T., Iono, D., Izumi, T., Kawabe, R., Kohno, K., Matsuo, H., Ota, N., Suto, Y., Takizawa, M.,

Yoshikawa, K., “The Sunyaev-Zel'dovich Effect at Five Arc-seconds: RXJ1347. 5-1145 Imaged by ALMA”, Publications of Astronomical Society Japan, in press.

- 32) Taquet, V., Furuya, K., Walsh, C., van Dishoeck, E. F., “A primordial origin for molecular oxygen in comets: A chemical kinetics study of the formation and survival of O<sub>2</sub> ice from clouds to disks”, accepted by Monthly Notices of the Royal Astronomical Society

## B) 査読無し論文

- 1) Tagawa, H., Umemura, M., 2017, “Rapid Mergers in a Mixed System of Black Holes and Neutron Stars”, 14th International Symposium on Nuclei in the Cosmos (NIC2016) 020803
- 2) Kirihaara, T., Miki, Y., Mori, M., Kawaguchi, T., & Rich, R. M. “Multilateral Study of the Andromeda Giant Stream: Implications for the progenitor, its MBH, and the M31 halo”, 2016, accepted to proceedings of IAU Symposium 321
- 3) Igarashi, A., Mori, M., Nitta, S., “A new concept of transonic galactic outflows and its application to the Sombrero galaxy”, accepted to Proceedings of IAU Symposium 321 "Formation and evolution of galaxy outskirts"
- 4) Furuya, K., Drozdovskaya, M. N., Walsh, C., van Dishoeck, E. F., “Water transport from collapsing prestellar cores to forming disks: evolution of the HDO/H<sub>2</sub>O ratio”, EAS publication series, 75-76, 259-263 (2016)

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

- 1) Umemura, M., “HPC at CCS and Latest Outcomes in Computational Astrophysics”, Edinburgh EPCC-Tsukuba CCS Collaboration Workshop, June 16-17, 2016, Edinburgh, UK
- 2) Furuya, K., “Formation and isotope fractionation of interstellar ices, and their delivery to a forming disk”, Workshop on Interstellar Matter 2016, October 19-21, 2016, Hokkaido, Japan
- 3) Aikawa, Y. “Chemical modelling of protoplanetary disks”, European Conference on Laboratory Astrophysics ECLA2016 “Gas on the Rocks”, November 21 - 25, 2016, CSIC, Madrid, Spain
- 4) Furuya, K. “Water delivery from cores to disks”, ISSI meeting “From qualitative to quantitative: Exploring the early solar system by connecting comet composition to protoplanetary disk models”, December 5-9, 2016, Bern, Switzerland

- 5) Furuya, K. “Isotopic fractionation in interstellar molecules”, IAU symposium 332 Astrochemistry VII-Through the Cosmos from Galaxies to Planets”, March 20-24, 2017, Puerto Varas, Chile
- 6) Umemura, M., "Novel Challenge for Radiative Transfer Solver in Astrophysics", Inverse Problems and Medical Imaging, Feb 13-17, 2017, University of Tokyo, Japan
- 7) Wagner, A. Y., “Triggering Star-formation” 2016 Oort Workshop: AGN Feedback, May 30 – June 1. 2016 Leiden Observatory, Leiden, Netherlands

#### B) 一般講演

- 1) Miki, Y., “GOTHIC: Gravitational Oct-Tree code accelerated by Hierarchical time step Controlling”, Perspectives of GPU computing in Science, September 26-28, 2016, Rome, Italy
- 2) Michikoshi, S., “Planetesimal Formation by Gravitational Instability of a Porous Dust Disk”, Japan-Germany Planet and Disk Workshop, September 25-30, 2016, Okinawa, Japan
- 3) Yoneda, H., Tsukamoto, Y., Furuya, K., Aikawa, Y. “Chemistry in a forming disk: main accretion phase”, Workshop on Interstellar Matter 2016, October 19-21, 2016, Hokkaido, Japan
- 4) Tanaka, S., “Higher order advection scheme for Vlasov Simulation”, The 7th East Asian Numerical Astrophysics Meeting, October 24-28, 2016, Beijing, China
- 5) Kobayashi, N., Enohata, K., Ishihara, T., Shiraishi, K., Umemura, M. "Rapid Dust Coagulation expedited by Turbulent Clustering in Protoplanetary Disks", Formation of the Solar System and the Origin of Life, Feb 20-24, 2017, Leiden, Netherlands
- 6) Sato, A., Shigeta, Y., Shoji, M., Kamiya, K., Shiraishi, K., Yabana, K., Umemura, M. "Ly alpha Irradiation in the Early Phase Milky Way Galaxy Responsible for Initiating Homochirality", Formation of the Solar System and the Origin of Life, Feb 20-24, 2017, Leiden, Netherlands

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

- 1) 相川祐理「ALMA 観測でとらえた原始星コアと原始惑星系円盤の揮発性物質」, 日本地球惑星科学連合 2016 年大会／アルマによる惑星科学の新展開(2016 年 5 月 22 日, 幕張メッセ)

- 2) 相川祐理「星・惑星系形成領域の分子進化：星間物質から惑星物質へ」，日本地球惑星科学連合 2016 年大会 スペシャルレクチャー（西田賞受賞記念講演）（2016 年 5 月 24 日，幕張メッセ）
- 3) 森正夫，“Numerical simulations of galaxy formation and evolution”，Tsukuba CCS-LBNL Collaboration Workshop（2016 年 6 月 12～13 日，筑波大学計算科学研究センター）
- 4) 梅村雅之，「Mergers of Accreting Stellar Mass Black Holes and Implications for GW150914」，新学術領域「重力波天体の多様な観測による宇宙物理学の新展開」研究会（2016 年 7 月 30 日，広島大学，東広島）
- 5) 相川祐理「デブリ円盤での化学反応」（招待講演）ALMA ワークショップ：デブリ円盤から太陽系へ」研究会（2016 年 8 月 8～9 日，千葉工大東京スカイツリータウンキャンパス）
- 6) 梅村雅之「巨大ブラックホール起源と重力波観測」，企画セッション「重力波初検出の意義と重力波天文学の幕開け」，日本天文学会 2016 年秋季年会（2016 年 9 月 14-16 日，愛媛大学，松山）
- 7) 相川祐理「星・惑星系形成領域の星間化学」，シンポジウム「ダスト形成から惑星の多様性へ：宇宙の物質進化における物理と化学のカップリング」（2017 年 3 月 8 日～9 日，東京大学小柴ホール）
- 8) 吉川耕司「「多次元ブラソフソルバーの開発」，JICFuS シンポジウム「素粒子・原子核・宇宙「京からポスト京に向けて」」（2017 年 2 月 16～17 日，筑波大学東京キャンパス文京校舎）

## B) その他の発表

- 1) 相川祐理「原始惑星系円盤の化学組成：最近の ALMA 観測の成果」宇宙生命計算科学連携拠点第 2 回ワークショップ（2016 年 4 月 27～28 日，筑波大学計算科学研究センター）
- 2) 古家健次「星・惑星系形成領域における水の重水素比」宇宙生命計算科学連携拠点第 2 回ワークショップ（2016 年 4 月 27～28 日，筑波大学計算科学研究センター）
- 3) 安部牧人，3 次元輻射流体力学による球状星団形成モデルの研究，第三回銀河進化研究会（2016 年 6 月 1～3 日，東北大学）
- 4) 藤原隆寛，銀河形成シミュレーションに向けて：SPH 法の性能比較，第三回銀河進化研究会（2016 年 6 月 1～3 日，東北大学）

- 5) 相川祐理「惑星系形成領域の有機物進化」, 日本地球惑星科学連合 2016 年大会／計算科学による惑星形成・進化・環境変動研究の新展開 (2016 年 5 月 24 日, 幕張メッセ)
- 6) 相川祐理「Molecular evolution in a forming disk」新領域「宇宙分子進化」研究会 (7 月 11～12 日, 北海道大学低温科学研究所)
- 7) 道越秀吾, 小久保英一郎, 「低密度ダストの重力不安定による微惑星形成」, 日本惑星科学会 2016 年秋季講演会 (2016 年 9 月 12～14 日, ノートルダム清心女子大学, 岡山)
- 8) 古家健次, Water deuteration as a probe of the origin of H<sub>2</sub>O in protoplanetary disks, 日本天文学会 2016 年秋季年会 (2016 年 9 月 14～16 日, 愛媛大学, 松山)
- 9) 道越秀吾, スイング増幅による渦状腕構造の形成とエピサイクル運動の位相同期, 日本天文学会 2016 年秋季年会 (2016 年 9 月 14～16 日, 愛媛大学, 松山)
- 10) 五十嵐朱夏, 遷音速銀河風モデルによる星形成率と銀河風速度の関係, 日本天文学会 2016 年秋季年会 (2016 年 9 月 14～16 日, 愛媛大学, 松山)
- 11) 桐原崇亘, M31 North-Western ストリームの母矮小銀河の軌道探査, 日本天文学会 2016 年秋季年会 (2016 年 9 月 14～16 日, 愛媛大学, 松山)
- 12) 加藤一輝, Cusp-core 問題における周期的な SN フィードバックによる重力場変動と DMH の中心密度分布の関連性, 日本天文学会 2016 年秋季年会 (2016 年 9 月 14～16 日, 愛媛大学, 松山)
- 13) 藤原隆寛, MUSCL 法を用いた Godunov SPH 法の高次精度化, 日本天文学会 2016 年秋季年会 (2016 年 9 月 14～16 日, 愛媛大学, 松山)
- 14) 高橋芳太, 梅村雅之, 「ARTIST コードによるブラックホール時空での一般相対論的輻射輸送シミュレーション」, 日本天文学会 2016 年秋季年会 (2016 年 9 月 14～16 日, 愛媛大学, 松山)
- 15) 小林直樹, 江野畑圭, 石原卓, 白石賢二, 梅村雅之, 「微惑星形成過程解明のための乱流の大規模直接数値計算と粒子追跡」, 日本天文学会 2016 年秋季年会 (2016 年 9 月 14～16 日, 愛媛大学, 松山)
- 16) 濱端航平, 江野畑圭, 石原卓, 白石賢二, 梅村雅之, 「乱流の直接数値計算を用いた原始惑星系円盤ダストの衝突付着成長シミュレーション」, 日本天文学会 2016 年秋季年会 (2016 年 9 月 14～16 日, 愛媛大学, 松山)

- 17) 郷田直輝, 小林行泰, 辻本拓司, 矢野太平, 上田暁俊, 宇都宮真, 鹿島伸悟, 亀谷收, 浅利一善, 山田良透, 吉岡諭, 穂積俊輔, 梅村雅之, 西亮一, 浅田秀樹, 長島雅裕, 石村康生, 中須賀真一, 酒匂信匡, ほか JASMINE ワーキンググループ一同, 「Nano-JASMINE と小型 JASMINE の進捗状況概要」, 日本天文学会 2016 年秋季年会 (2016 年 9 月 14~16 日, 愛媛大学, 松山)
- 18) 藤原隆寛, 森正夫, 「MUSCL-Godunov-SPH 法への流速制限関数の実装」, 日本流体力学会 2016 年会 (2016 年 9 月 26~28 日, 名古屋工業大学, 名古屋)
- 19) 梅村雅之, 「CCS におけるポスト「京」重点課題・萌芽的課題について」, 第 8 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」ー発展する計算科学と次世代の計算機ー, 2016 年 10 月 17 日~18 日, 筑波大学 大学会館, つくば市
- 20) 高水裕一, 前田恵一, Bubble universe, 第 26 回一般相対論および重力」研究会 (2016 年 10 月 24 日~28 日, 大阪市立大学, 大阪)
- 21) 櫻井 幹記, 古谷 眸, 岡本 直也, 石原 卓, 圧縮性乱流直接数値シミュレーション手法の検討, 第 30 回数値流体力学シンポジウム(2016 年 12 月 12~14 日, タワーホール 船堀, 東京)
- 22) 五十嵐朱夏, 星形成銀河からのアウトフローの理論モデル, Galaxy-IGM 研究会(2016 年 12 月 5~7 日, 信州大学, 長野)
- 23) 梅村雅之, 久喜奈保子, 安部牧人, Ken. Csuprynski, 「Hybrid Scheme of Ly $\alpha$  Radiative Diffusion and Transfer」, Galaxy-IGM 研究会 (2016 年 12 月 5~7 日, 信州大学, 長野)
- 24) 安部牧人, SEURAT: SPH scheme extended with UV line radiative transfer, Galaxy-IGM 研究会 (2016 年 12 月 5~7 日, 信州大学, 長野)
- 25) 田川寛通, 梅村雅之, 「多重 BH の合体による GW150914 の説明」, 理論懇シンポジウム(2016 年 12 月 20~22 日, 東北大学, 仙台)
- 26) 桐原崇亘, 「M31 におけるマイナーマージャー現象を用いた銀河の内部構造の研究」, 理論懇シンポジウム(2016 年 12 月 20~22 日, 東北大学, 仙台)
- 27) 吉川耕司「重元素の超微細構造線によるダークバリオンの観測可能性」, 第 4 回「銀河進化と遠方宇宙」研究会, (2017 年 1 月 7 日~9 日, アーデンホテル阿蘇, 熊本)
- 28) 道越秀吾「Chariklo の二重環の構造と衛星との相互作用による長期進化」, 第 5 回衛星星系研究会: 冥王星系の起源 (2017 年 1 月 25~26 日, 東京工業大学, 東京)



- 29) 道越秀吾, 小久保英一郎, 「ケンタウルス族 Chariklo の環の構造」, 日本天文学会 2017 年春季年会 (2017 年 3 月 15~18 日, 九州大学, 福岡)
- 30) 五十嵐朱夏, 森正夫, 新田伸也, 「銀河風の遷音速モデルと星形成銀河への応用」, 日本天文学会 2017 年春季年会 (2017 年 3 月 15~18 日, 九州大学, 福岡)
- 31) 渡邊歩, 吉川耕司, 岡本崇, (「重元素の超微細構造線を用いた中高温銀河間ガスの観測可能性について」, 日本天文学会 2017 年春季年会 (2017 年 3 月 15~18 日, 九州大学, 福岡)
- 32) 藤原隆寛, 森正夫, 「Integral Approach による, Density Independent SPH 法と Godunov SPH 法の改良」, 日本天文学会 2017 年春季年会 (2017 年 3 月 15~18 日, 九州大学, 福岡)
- 33) 井上昭雄, 長谷川賢二, 石山智明, 矢島秀伸, 清水一紘, 梅村雅之, 今野彰, 播金優一, 澁谷隆俊, 大内正己, 「宇宙再電離期のライマン  $\alpha$  輝線銀河シミュレーションとすばる Hyper Suprime-Cam 探査結果の比較」, 日本天文学会 2017 年春季年会 (2017 年 3 月 15~18 日, 九州大学, 福岡)
- 34) 安部牧人, 「高赤方偏移宇宙の Ly $\alpha$  輝線銀河と Ly $\alpha$  光子の輻射輸送」, 第 2 回宇宙史サロン (2017 年 3 月 21 日, 筑波大学, 茨城)

#### (4) 著書, 解説記事等

- 1) 梅村雅之, 福江純, 野村英子著, シリーズ<宇宙物理学の基礎>「輻射輸送と輻射流体力学」, 日本評論社, P1-P396, 2016 年 12 月 25 日
- 2) 梅村雅之, 「超巨大ブラックホール」, Newton 別冊シリーズ, 2016, 8 月 25 日
- 3) 相川祐理, 「水素の科学 第 1 回水素とは何か?」, Newton 11 月号, 2016 年 9 月 26 日
- 4) 田中賢, 「宇宙の大規模構造の謎に迫る「宇宙論的ブラソフシミュレーション」の高次精度化に挑戦」月刊 JICFuS, 2016 年 11 月 22 日
- 5) 相川祐理, 「ALMA による原始惑星系円盤の観測」, 天文月報 4 月号, 2016 年 3 月 20 日

#### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

##### 【宇宙生命計算科学連携 (CAB)】

- 1) 星間アミノ酸部会

宇宙・生命分野間連携により，星間空間におけるアミノ酸前駆体ならびにアミノ酸の生成過程についての量子力学計算を進めた。

2) 宇宙乱流部会

名古屋大学工学研究科乱流グループとの協働により，原始惑星系円盤におけるダストと乱流の相互作用による微惑星形成過程を，ナビエ・ストークス方程式の直接計算により探究した。

【国際連携】

- 1) CCS-LBNL Lawrence Berkeley National Laboratory Joint Meeting 2016, CCS, University of Tsukuba, Tsukuba, Japan (May 12-13, 2016) (Umemura, Mori)
- 2) Edinburgh EPCC-Tsukuba CCS Collaboration Meeting 2016, EPCC, University of Edinburgh, Edinburgh, UK (June 16-17, 2016) (Umemura)

8. シンポジウム，研究会，スクール等の開催実績

- 1) 「宇宙生命計算科学連携拠点 第2回ワークショップ」, 2016年4月27日, 28日, 筑波大学計算科学研究センターワークショップ室, つくば
- 2) ポスト京・萌芽的課題「惑星科学」キックオフWS  
2016年9月19日, 神戸大学 先端融合研究環境統合研究拠点, 神戸
- 3) 「天体形成研究会」  
2016年10月21日～22日, つくば国際会議場 小会議室 303, つくば



- 4) “Workshop on Interstellar Matter 2016”, 2016 年 10 月 19 日–21 日  
北海道大学低温科学研究所, 札幌
- 5) 「銀河・銀河間物質に関するワークショップ」  
2016 年 12 月 5 日～7 日, 信州大学, 松本
- 6) 「初代星・初代銀河研究会 2016」  
2016 年 10 月 25 日～27 日, 金沢歌劇座, 金沢市
- 7) 「超巨大ブラックホール研究推進連絡会」第 4 回ワークショップ  
2016 年 12 月 9 日～10 日, 東京大学天文学教育研究センター, 三鷹市
- 8) ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第 1 回 公開シンポジウム  
「惑星の起源・進化と環境変動の解明を目指して」  
2017 年 3 月 9 日, 神戸大学 先端融合研究環境統合研究拠点, 神戸

## 9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

・梅村雅之

### 【本部】

教育研究評議会委員

人事企画委員会委員

任用部会委員

研究推進会議委員

情報環境委員会委員

全学年俸制教員評価実施委員会委員

### 【系・センター】

計算科学研究センター センター長

計算科学研究センター 運営委員会委員長

計算科学研究センター 人事委員会委員長

計算科学研究センター 宇宙物理研究部門主任

計算科学研究センター 運営協議会委員

計算科学研究センター 研究企画室委員

数理物質系人事委員会総会委員

物理学域 運営委員会委員

物理学域 宇宙物理理論グループ長

・相川祐理

【系・センター】

計算科学研究センター 運営委員会委員  
計算科学研究センター 人事委員会委員  
物理学域 運営委員会委員

・森正夫

【全学】

ハラスメント防止対策委員

【系・センター】

計算科学研究センター 共同研究委員会学内委員  
計算基礎科学連携拠点企画チーム  
学際計算科学連携室  
JCAHPC 技術審査委員会委員  
PPX システム調達仕様策定委員  
物理学域図書委員会委員

## 10. 社会貢献・国際貢献

・梅村雅之

竹園東小学校講演会「宇宙の旅」，2016 年 11 月 29 日  
日本天文学会欧文研究報告編集顧問  
国立天文台理論専門委員会委員長

・相川祐理

日本天文学会代議員  
日本天文学会欧文研究報告編集員  
IAU Organizing Committee Member of Commission H2 Astrochemistry  
“Early Phase of Starformation 2016” Scientific Advisory Committee  
“Water in the Universe” SOC

## 11. その他

海外長期滞在，フィールドワークなど

### III. 原子核物理研究部門

#### 1. メンバー

教授	中務 孝、矢花一浩（量子物性部門兼務）
講師	橋本幸男
助教	日野原伸生（国際テニユアトラック）
研究員	温 凱（2017.1 転出）、鷲山広平、野村昂亮（PD 学振）、Guillaume Scamps（2016.10 着任）
学生	大学院生 5 名（うち特別研究学生 1 名）、学類生 1 名

#### 2. 概要

核子（陽子・中性子）の多体系である原子核の構造・反応・応答などの多核子量子ダイナミクスの研究を推進している。安定線（ハイゼンベルグの谷）から離れた放射性アイソトープの原子核の構造と反応、エキゾチックな励起状態の性質、様々な集団運動の発現機構など、未解決の謎の解明に取り組んでいる。原子核の研究は、フェルミ粒子の量子多体系計算という観点で、物質科学や光科学、冷却原子系の物理と密接なつながりをもつ。また、クォーク・グルーオンのダイナミクスを記述する格子 QCD に基づく核力の計算、軽い原子核の直接計算などが進展する中、素粒子物理学との連携も重要性が増している。ニュートリノの解明に向けたニュートリノレス二重ベータ崩壊の観測実験や、素粒子標準模型のテストに関わる実験などにも原子核理論の精密計算が不可欠とされている。また、元素の起源や星の構造にも原子核の性質は深く関わり、宇宙物理学とも密接に関係している。本部門のメンバーは、このような幅広い課題に取り組み、分野の枠を超えた研究を推進している。

#### 3. 研究成果

##### 【 1 】大振幅集団運動理論を用いた核反応ダイナミクスの記述（温、中務）

線形領域を超える大振幅集団運動を扱う理論として、断熱自己無撞着集団座標法 (Adiabatic Self-consistent Collective Coordinate Method: ASCC 法) を我々は提唱しており、この理論では、少数自由度の集団空間（座標）の自己無撞着な抽出が可能である。この理論に基づいて、低エネルギーの多核子反応ダイナミクスを記述する最適な反応経路を導出する研究を実施した。虚時間発展法と有限振幅法を組み合わせた反復法を用いて、今年度は、アルファ粒子と酸素（融合核：ネオン）と、酸素・酸素（融合核：硫黄）の散乱・融合過程を記述する集団座標をマイクロに決定した。図 1 に前者の融合反応に対して求められた密度分布の変化を示す。核反応の集団運動を支配するポテンシャルと質量パラメータを完全微視的に決定し、低エネルギー・サブバリア領域における融合断面積を計算することに成功した。

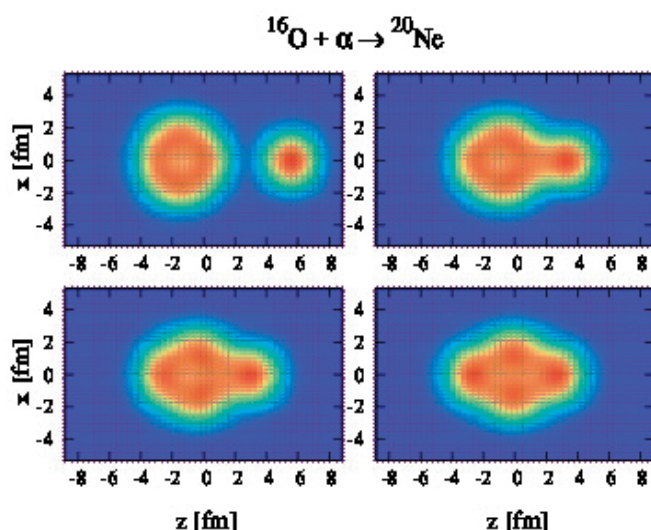


図1:  $^{16}\text{O} + \alpha \rightarrow ^{20}\text{Ne}$  の核融合経路上の 4 点における密度分布 ( $x$ - $z$  平面)

【 2 】アイソスピン不変なエネルギー汎関数とアイソスピン対称性の破れ (中務、佐藤 (大阪市大)、Dobaczewski (ワルシャワ大)、Satula (ワルシャワ大))

現在主流となっている原子核のエネルギー密度汎関数は、Skyrme 形式、Gogny 形式、共変形式 (相対的) の 3 つに大別されるが、どれも陽子と中性子の密度の汎関数としてエネルギーが与えられている。しかし、陽子や中性子はアイソスピンの第 3 成分の固有状態であり、アイソスピン空間における回転に対して不変ではなく、一般にはアイソスピンが任意の方向を向いた状態、すなわち陽子と中性子が混合した状態に拡張する必要がある。これを実行するため、昨年度までに、陽子・中性子を区別せずに「核子」として扱う新しい

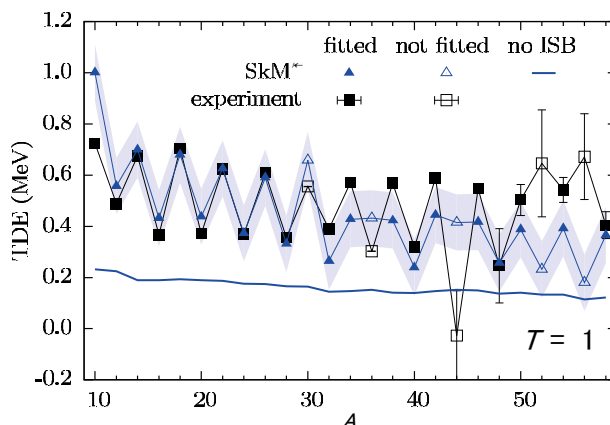


図2: Triple displacement energy (TDE)と呼ばれるアイソスピン対称性の破れの指標。明示的に破る項を入れない場合が実線、入れた結果が三角で示されている。

Kohn-Sham 方程式と、それに対応する非対角要素を含むエネルギー汎関数を構築し、その計算コード開発を実施した。今年度は、アイソスピン対称性の破れに関する昨年の解析をさらに詳細に実施し (図 2)、破れを記述するために新たに導入したエネルギー汎関数が、核子・核子散乱の散乱長における対称性の破れの大きさと無矛盾であることを明らかにした。

また、いくつかの実験で測定された原子核質量のデータについて、理論計算の値と大きなズレが見つかり、再測定の必要性を提唱した。

### 【 3 】対振動状態における集団座標(中務、倪(D1))

原子核の励起状態の中で、スピン・パリティが $0^+$ の状態には対振動状態と解釈される状態が存在する。これは、ゲージ対称性を破る秩序パラメータであるエネルギー・ギャップの大きさが揺らぐ(振動する)集団的状态であると解釈されてきた。しかし、その性質にはまだまだ未解決な点が多い。

我々は、対相関がもたらす集団的ダイナミクスを記述するため、厳密解を求めることができる対相関模型(リチャードソン模型)に対して、ASCC法を用いて集団座標を微視的・非経験的に決定した。これにより、これまで仮定されていたギャップ・パラメータを集団座標として扱うことには問題が多く、それとは全く異なる集団座標が導出されることを示した。これは、過去の多くの解析の問題点を指摘するものであり、重要な成果であると言える。

### 【 4 】中性子星内殻における1次元周期構造の密度汎関数計算(中務、柏葉(M2))

中性子星の内殻(インナー・クラスト)と呼ばれる表面に近い領域では、中性子の海の中に原子核が周期的に配置された構造を取ると予想されている。中心に近づいていくと、やがて一様な核物質になると考えられるが、その直前には、パスタ相と呼ばれる奇妙な形の原子核が現れると考えられている。その中でも、スラブ相(ラザーニャ相)と呼ばれる板状の原子核が現れる領域があると予想されており、今回、このスラブ相に対して、厳密な境界条件を考慮した完全自己無撞着な密度汎関数計算を実行することに成功した。周期的なポテンシャルに対するブロッホ波動関数は固体のバンド計算で良く知られているが、これと同じ計算を中性子星物質スラブ相について行った。固体のバンド計算では、原子核(イオン)によって作られた周期的ポテンシャル中の電子の波動関数を求めるわけだが、原子核では周期的ポテンシャル自体、核子(陽子・中性子)の自己無撞着ポテンシャルとして与えられ、核子運動の自由度だけから自発的に現れた周期性である。これまで、このような計算を自己無撞着に行った例はなく、世界初の成果である。

### 【 5 】対相関の精密化(日野原)

平均場近似では対相関はゲージ対称性の自発的破れをもたらし、対回転モードと呼ばれる対称性を回復させるゼロエネルギーの南部=Goldstone(NG)モードが、超伝導原子核の準粒子乱雑位相近似(QRPA)解として現れる。昨年度に我々は対回転の慣性モーメントが原子核の対



相関の性質を反映する指標として優れていることを指摘した。従来の対相関の指標は対ギャップであり、これを奇核と偶核の束縛エネルギー差(OES)の実験値に対応させ、対相関の性質を議論してきた。しかし、対ギャップが実験観測量ではないことや、対ギャップ、OES それぞれの定義が一意ではないこと、OES に含まれる時間反転に対して符号を変える項の理解が進んでいないことにより、対相関の詳細な性質のみを OES から抜き出すのは難しく、それゆえに対密度汎関数としては最も簡単な形と密度依存性しか考慮されておらず、対密度汎関数の精密な議論は進んでいなかった。対回転の慣性モーメントを指標に用いることで、これらの問題を回避し、理論と観測値の直接的な比較が可能となり、対密度汎関数の理解も深めることが可能となる。まずは、Skyrme 型の有効相互作用には存在するが、通常対相互作用では考慮されていない対密度の空間微分項(運動量依存項)依存性を調べた。錫と鉛の同位体で対密度の空間微分項の結合定数を変えながら対回転の慣性モーメントを系統的に計算し、実験値を系統的に再現するためには、この対密度の空間微分項が重要であることを示した。将来、原子核密度汎関数の結合定数を、実験データを用いて最適化する際には、対回転の慣性モーメントが有用であると言える。

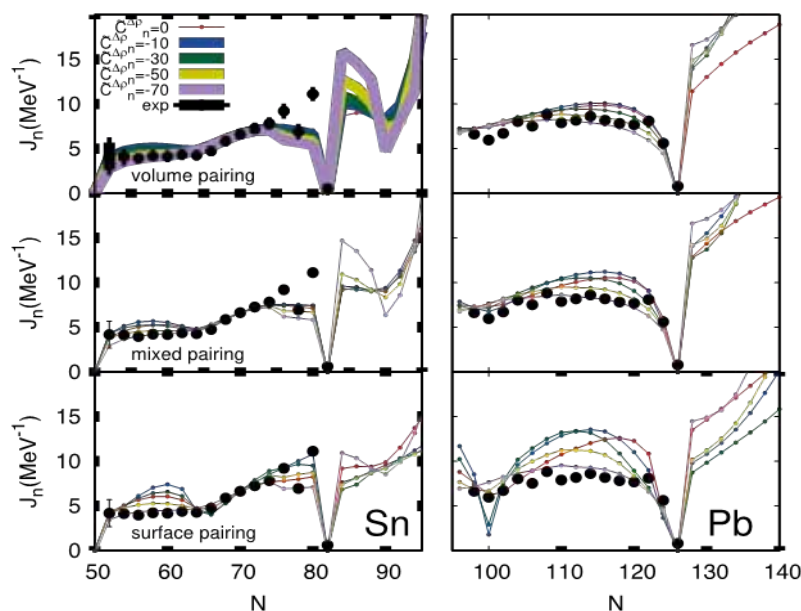


図3: 錫と鉛の同位体での対回転の慣性モーメントの対密度の空間微分項依存性

## 【 6 】一般化された原子核密度汎関数での Thouless の定理の証明 (日野原)

エネルギー重率和則に関する Thouless の定理ではハミルトニアンと遷移演算子の二回交換関係によって、本来すべての励起状態の足し上げが必要となる和則を基底状態の期待値と



結びつけることができるため、QRPA の計算コードのチェックや、巨大共鳴の情報の抽出に大変有用である。原子核密度汎関数理論でも Thouless の定理は有効であることは広く知られていたが、従来の定理の証明ではハミルトニアンを用いるため、ハミルトニアンが存在しない原子核密度汎関数理論の場合には厳密には定理の適用の範囲外であった。ハミルトニアンとは対応がない一般化された原子核密度汎関数の場合において、Thouless の定理をハミルトニアン演算子を使うことなく証明し、定理の証明を行った。汎関数の局所ゲージ不変性が保たれている場合は従来の Thouless の定理が適用可能であるが、これが破れている場合は対称性の破れに起因する項が発生することを示した。また有限振幅法の複素積分の方法によって和則を計算し、局所ゲージ対称性が破れている場合においても拡張された定理が有効であることを数値的に示した。

### 【 7 】 超流動原子核の衝突における摩擦係数の評価（橋本）

原子核内に存在する核子（陽子・中性子）の間には、対相関と呼ばれる、2 つの核子を対に組むような相関が存在することが知られている。対相関を考慮して微視的に原子核の反応を記述するため、時間依存密度汎関数法に対密度を導入した time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov (TDHFB) 法が用いられる。これまでに、ラグランジュ格子と調和振動子基底を組み合わせたハイブリッド基底を用いた TDHFB コードを開発し、その有効性を実証した。今回、その計算コードを超流動球形原子核  $^{20}\text{O}$  同士の正面衝突  $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$  に応用し、微視的な計算である TDHFB 法から巨視的な摩擦項に用いられる摩擦係数を抽出し、その初期衝突エネルギー依存性を明らかにした。先行研究として TDHF に基づいた計算があるが、対相関を含んだうえでの摩擦係数の導出は本研究の結果が初めてとなる。一連の計算によって以下の結果を得た：摩擦係数は、クーロン障壁近傍 1 MeV くらいのエネルギーでの衝突の際には他のエネルギー領域に比べて大きく、同時に、移行エネルギー量も大きくなる。一方、この近傍領域を越えて衝突のエネルギーを 10 MeV にわたって増加させると、摩擦係数は急速に小さくなり衝突のエネルギーにあまり依存しないようになる。摩擦係数についての、この衝突エネルギー依存性は、定性的には以下のように理解できる：クーロン障壁近傍においては衝突速度が低下するので核間のエネルギー移動が（比較的）長い時間にわたり行われる

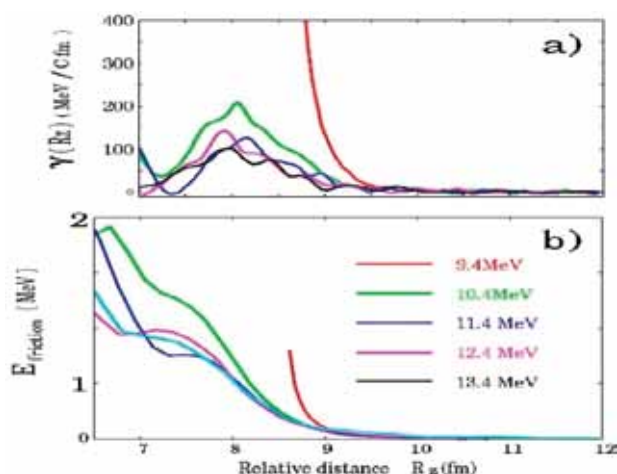


図4: a):酸素20原子核間の相対距離と摩擦係数、b):散逸したエネルギーと相対距離の関係をそれぞれ示す。

ので、強い摩擦となって現れる。一方、衝突エネルギーの増加に伴い、エネルギー移動に関わる時間が減少するので、摩擦は弱くなる。実際には、どの衝突エネルギー領域でも衝突直後から対相関エネルギーが急速に減少するので、その効果を明らかにするために、さらに精密な計算が必要である。

### 【 8 】 3 次元空間上の有限振幅法の開発（鷲山、中務）

質量数 100 前後の原子核では、低励起エネルギー領域で複数の変形状態が共存したり、陽子数・中性子数の変化に対し基底状態や低励起状態が急激な構造変化を示したりすることが知られている。このような原子核を大振幅集団運動の観点から理解するために我々は自己無撞着な密度汎関数法による四重極集団模型の構築を目指している。その集団ハミルトニアンに現れる集団質量を密度汎関数法に基づく準粒子乱雑位相近似(QPRA)法で評価するには非軸対称変形核に対する QRPA 計算が必要である。これが大規模数値計算となるため、これまでの QRPA 計算は軸対称原子核への応用に限られてきた。近年、大規模数値計算の要因である残留相互作用の計算及び大次元の QRPA 行列要素の計算と対角化を回避して QRPA 計算を実行できる有限振幅法が提案された。有限振幅法では、大規模数値計算となる残留相互作用の計算と QRPA 行列の対角化を露わに行なうことなく、外場に対する原子核の線形応答モードを記述する。

本研究では、昨年度に引き続き 3 次元空間上での有限振幅法 QRPA 計算の数値計算コードの開発を行なった。まず、有限振幅法より得られた強度関数と和則の分析から数値計算コードの修正を行ない、和則を満たすようにコードの改良を行なった。次に、一粒子波動関数の保持する対称性の分析からコードの計算量の削減を行ない、およそ 30% 程度数値計算量を減らすことが出来た。また、非軸対称原子核  $^{110}\text{Ru}$  ( $\beta=0.31$ ,  $\gamma=20^\circ$ ) の単極応答、及び、アイソスカラー四重極応答に応用し、強度関数と和則の計算を行ない、強度関数が和則を満たすことを示し、四重極演算子のそれぞれの  $z$  成分に対する強度関数の分離を得た。今後は大振幅集団運動に対する質量パラメータ計算を行ない、集団ハミルトニアンの構築を目指す。

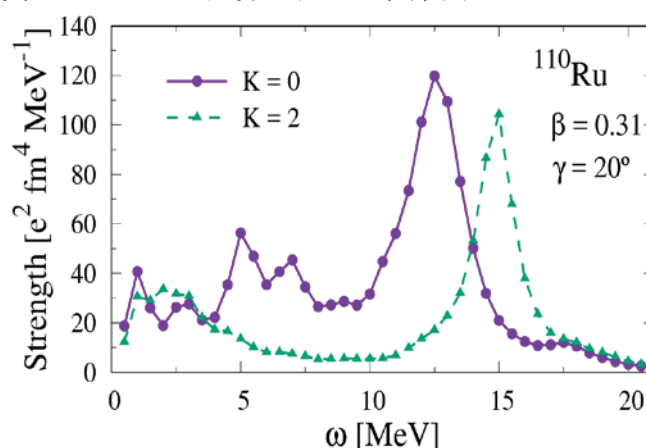


図5: 非軸対称核  $^{110}\text{Ru}$  の四重極振動に対する強度関数

### 【 9 】重陽子—原子核全反応断面積の公式化（鷲山、養茂（阪大）、緒方（阪大））

重陽子—原子核弾性散乱は様々な分野で重要な基礎的反応過程であり、断面積評価のための汎用公式がいくつかある。それらは巨視的な反応モデルを基に比較的狭いエネルギー領域に適用範囲が限られている。本研究では、広範囲のエネルギーにおける断面積の微視的な評価及びその少数パラメータによる公式化を行なった。さらに、放射線施設や医療機関などで広く用いられる粒子輸送コード PHITS にこの公式を提供する目的で研究を行なった。全反応断面積の計算には重陽子の分解反応を考慮した連続状態離散化結合チャンネル法を採用し、重陽子—原子核間ポテンシャルは微視的な畳み込み模型を用い、原子核の密度分布は微視的な密度汎関数法で評価した。そして、この方法で得られた 15 の原子核に対する全反応断面積を重陽子の入射エネルギー( $10\text{MeV} < E < 1000\text{MeV}$ )、原子核の陽子数、核子数の関数で公式化した。この関数は既存の実験データを再現し、以前に提案された汎用公式よりも高精度で広範囲に適用可能な反応断面積公式を得た。この公式は粒子輸送コード PHITS にも既に組み込まれており、広く使われ始めている。

### 【 10 】奇核の分光学的性質に関する研究（野村、Vretenar（ザグレブ大学）、Niksic（ザグレブ大学））

エネルギー密度汎関数理論と particle-core coupling の枠組みに基づいて、陽子・中性子いずれかが奇数の核種（奇核）の分光学的性質を計算するための方法を新たに開発した。この方法では、偶偶核コアのポテンシャルエネルギー面、unpaired particle の single-particle energy と occupation probability を相対論的密度汎関数に基づいた平均場モデルで計算し、それらを微視的インプットとして particle-boson-core coupling のハミルトニアンを決定した。軸対称変形した奇核種 Eu および Sm 同位体にこの方法を適用し、低エネルギー励起スペクトルおよび電磁遷移強度の実験値を再現することができた。希土類領域の偶偶核では、中性

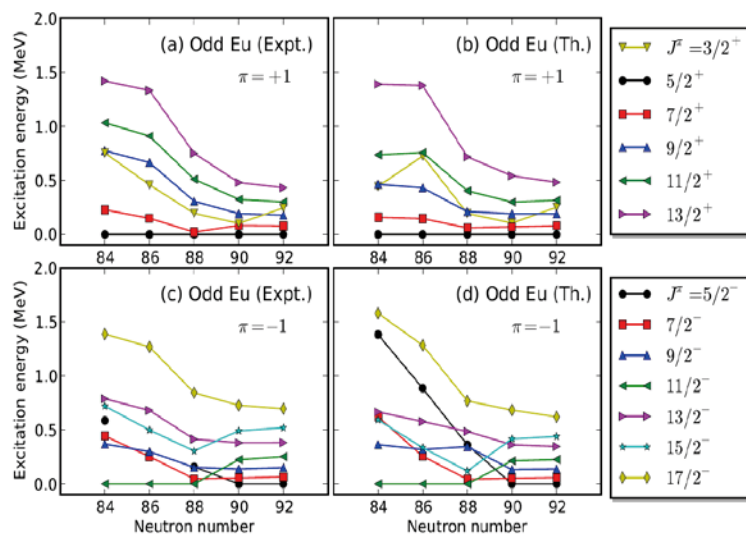


図6: 奇核 Eu 同位体の正負パリティ低エネルギー励起スペクトルの遷移

子数 90 近傍において球形から軸対称変形への形状相転移が良く知られているが、本研究において、unpaired fermion の形状相転移に与える影響を解析した。変形、励起エネルギー、電磁遷移などの物理量を計算し、それらの値が中性子数の増減によって急激に変化することを示すことで、偶偶核において見られるのと同様の形状相転移が奇核系でも発現することを明らかにした。

【 11 】 質量数 100 近傍の中性子過剰核における形状相転移と変形共存（野村、Rodriguez-Guzman（クウェート大学）、Robledo（マドリッド自治大学））

Gogny 型密度汎関数に基づいて相互作用するボソン模型ハミルトニアンを導く方法を用いて、近年実験的理論的に大きな注目を集めている、質量数 100 近傍の中性子過剰 Ru, Mo, Zr, Sr 同位体における形状進化の記述を行った。この方法では、Gogny-D1M HFB 計算でまず 4 重極変形空間でのポテンシャルエネルギー面を計算し、それをボソン模型ハミルトニアンの内部固有状態での期待値に写像することで、これらの原子核の集団励起状態を記述するためのボソンハミルトニアンのパラメータを決定した。主要な結果は、Ru および Mo 原子核において gamma 不安定な構造が多く見られること、Zr および Sr においてプロレートオブレート変形共存を示唆したことである。励起エネルギーや電磁遷移強度などの分光学的性質の実験値との良い一致が得られ、実験に先駆けた理論的予言も行った。

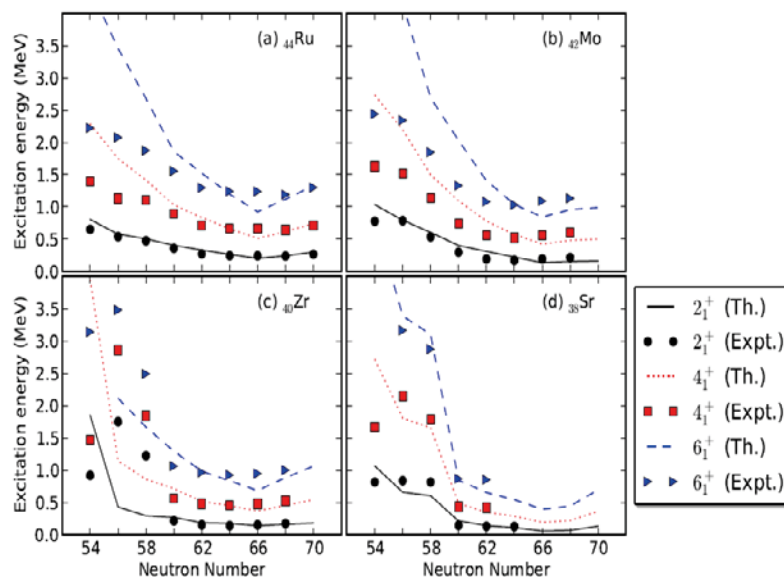


図7: 偶偶核 Ru, Mo, Zr, Sr 同位体の低励起状態の遷移

### 【 12 】 Pair transfer probabilities obtained by projection method (Scamps、橋本)

We developed a projection method to determine the transfer probabilities in reactions at energies lower than the barrier. This method works also for time-dependent Hartree-Fock Bogoliubov (TDHFB) method with two superfluid fragments. In that case, both fragments break the particle number symmetry, then we have to project on the good number of particles in both fragments. We tested this method on a simple toy model. This model improves the comprehension of the nuclear Josephson effect and the fluctuation of the fusion barrier in collisions between two superfluid fragments. One article is in preparation on that subject.

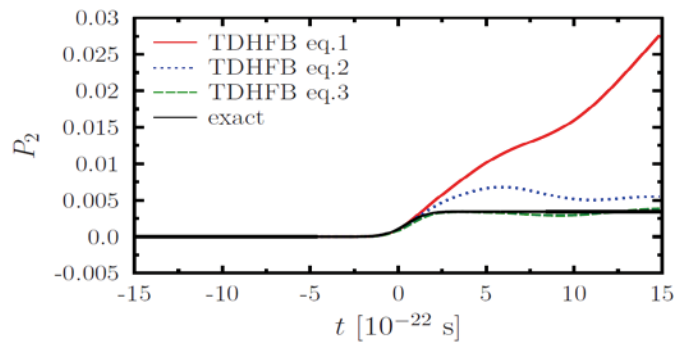


図8: Pair transfer probability as a function of time with several prescriptions of the TDHFB equations compared to the exact solution

### 【 13 】 Effect of pair transfer on fusion reactions using coupled channel methods (Scamps、萩野 (東北大))

We improved the phenomenological description of the transfer and fusion reaction with the coupled channel method. In a precedent study, it was shown that it was not possible to simultaneously describe the fusion cross section and the transfer probabilities. By taking into account different collective states after the neutron pair transfer in the coupling scheme, we improved the simultaneous description of the  $^{40}\text{Ca}+^{96}\text{Zr}$  and  $^{40}\text{Ca}+^{64}\text{Ni}$  experimental data.

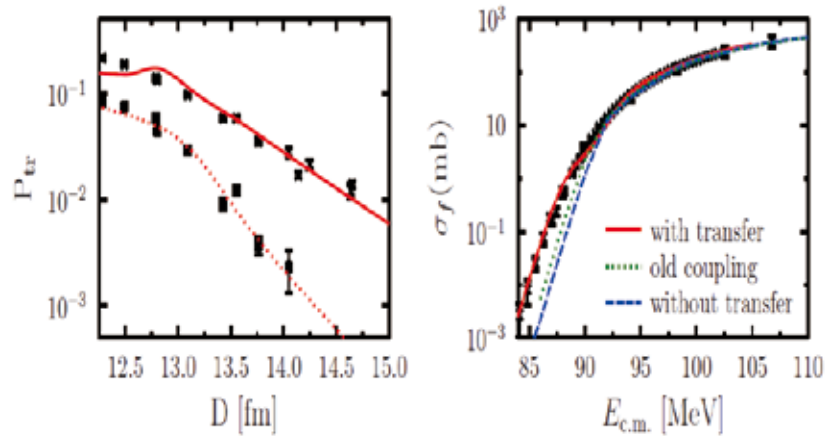


図9: (Left) Transfer probabilities for the reaction  $^{40}\text{Ca}+^{96}\text{Zr}$ , the experimental data for one-neutron (crosses) and two-neutron (square) are compared to coupled-channels calculations (solid line for 1n and dotted line for 2n). (Right) : fusion cross section from the experimental data (dashed blue line) compared to the coupled-channels calculation of ref. [G. Scamps and K. Hagino, Phys. Rev. C 92, 054614 (2015)] (dotted green line) and the present calculation (solid red line)

**【 14 】 Description of the excitation energy using the time-dependent Hartree-Fock + BCS theory (Scamps, Lacroix (IPNO, CNRS/IN2P3), Rodriguez (GANIL) and Farget (GANIL))**

In collaboration with an experimental group, C. Rodriguez and F. Farget at GANIL, we developed a method to determine the excitation energy as a function of the center of mass energy in a given transfer channel. We used the time-dependent Hartree-Fock+BCS method to determine the transfer probabilities and the average excitation energy. The method is applied to the reaction involving a  $^{238}\text{U}$  beam on a  $^{12}\text{C}$  target, which has recently been measured at GANIL. It is shown that the excitation energy calculated with the microscopic theory compares well with the experimental observation, provided that the competition with fusion is properly taken into account.



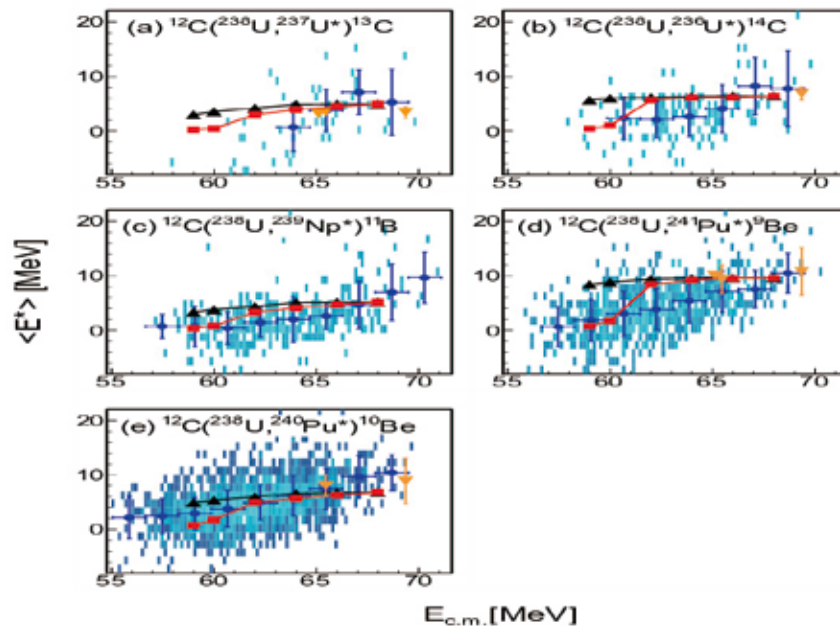


図10: Average excitation energy as a function of the center of mass energy for the main channels observed experimentally: experimental data (blue dots), TDHF + BCS results (black triangles), TDHF + BCS results where the excitation energy has been shifted by 3 MeV (red squares), and the HIPSE results (orange down triangles). In the latter case, error bars correspond to the widths of the calculated distributions. The superimposed blue (gray) areas correspond to the experimental event-by-event distributions of the excitation energy.

#### 4. 教育

1. 柏葉優、修士（理学）、「中性子星内殻におけるスラブ相に対する完全自己無撞着計算」

#### 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

##### 【1】 外部資金

1. 日本学術振興会科学研究費・基盤研究(B)、中務孝、代表、2013-2015 年[期間延長]、1,763,592 円 (H28 年度直接経費)、「原子核の低エネルギー集団励起と核融合・核分裂機構の解明」
2. 科研費・新学術領域研究（研究領域提案型）、中務孝、分担、2012-2016 年、

- 1, 000, 000 円 (H28 年度直接経費)、「冷却原子を用いた中性子過剰な低密度核物質の状態方程式」
3. JST ImPACT「核変換による高レベル放射性廃棄物の大幅な低減・資源化」、中務孝、課題責任者、2014-2018 年、6, 000, 000 円 (H28 年度)、「核構造計算による核反応モデルの高精度化」
4. 日本学術振興会科学研究費・若手研究(B)、日野原 伸生、代表、2016-2019 年、2016 年度直接経費 900, 000 円、「中性子-陽子対相関・対凝縮の解明」

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. K. Matsuyanagi, M. Matsuo, T. Nakatsukasa, K. Yoshida, N. Hinohara, and K. Sato,  
“Microscopic derivation of the Bohr– Mottelson collective Hamiltonian and its application to quadrupole shape dynamics”,  
Phys. Scr. 91 (2016) 063014 [Invited paper].
2. T. Nakatsukasa, K. Matsuyanagi, M. Matsuzaki, and Y. R. Shimizu  
“Quantal rotation and its coupling to intrinsic motion in nuclei”,  
Phys. Scr. 91 (2016) 073008 [Invited paper].
3. T. Nakatsukasa, K. Matsuyanagi, M. Matsuo, and K. Yabana,  
“Time-dependent density-functional description of nuclear dynamics”,  
Rev. Mod. Phys. 88, (2016) 045004 [Invited paper].
4. K. Wen and T. Nakatsukasa,  
“Self-consistent collective coordinate for reaction path and inertial mass”,  
Phys. Rev. C. 94 (2016) 054618.
5. G. Watanabe, S. Yoon, F. Dalfovo, and T. Nakatsukasa,  
“Multiple period states of the superfluid fermi gas in an optical lattice”,  
J. Phys. Conf. Ser. 752 (2016) 012002.
6. Y. Kashiwaba and T. Nakatsukasa,  
“Density functional calculations for the neutron star matter at subnormal density”,  
JPS Conf. Proc. 14, (2017) 020801.
7. K. Wen, F. Ni, and T. Nakatsukasa,  
“Nuclear reaction path and inertial mass in the self-consistent collective



- coordinate method”,  
PoS(INPC2016) 211 (2017).
8. S. Ebata, and T. Nakatsukasa  
“Octupole deformation in the nuclear chart based on the 3D Skyrme  
Hartree-Fock plus BCS model”, Phys. Scr. in press.
  9. K. Wen and T. Nakatsukasa,  
“Adiabatic self-consistent collective path in nuclear fusion reactions”,  
Phys. Rev. C, in press.
  10. N. Hinohara, W. Nazarewicz,  
“Pairing Nambu-Goldstone Modes within Nuclear Density Functional  
Theory”,  
Phys. Rev. Lett. 116, 152502 (2016).
  11. Y. Hashimoto and G. Scamps,  
Gauge angle dependence in time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov  
calculations of  $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$   
head-on collisions with the Gogny interaction,  
Phys. Rev. C94, 014610 (2016).
  12. K. Minomo, K. Washiyama, K. Ogata,  
“Deuteron-nucleus total reaction cross sections up to 1 GeV”,  
J. Nucl. Sci. Technol. 54, 127 (2017).
  13. K. Nomura, T. Niksic, and D. Vretenar,  
“Beyond-mean-field boson-fermion model for odd-mass nuclei”,  
Phys. Rev. C 93, 054305 (2016).
  14. K. Nomura, R. Rodriguez-Guzman, and L. M. Robledo,  
“Structural evolution in  $A \sim 100$  nuclei within the mapped  
interacting boson model based on the Gogny energy density functional”,  
Phys. Rev. C 94, 044314 (2016).
  15. T. Grahm, S. Stolze, D. T. Joss, R. D. Page, B. Saygi, D.  
O'Donnell, M. Akmal, K. Andgren, L. Bianco, D. M. Cullen, A. Dewald,  
P. T. Greenlees, K. Heyde, H. Iwasaki, U. Jakobsson, P. Jones,  
D. S. Judson, R. Julin, S. Juutinen, S. Ketelhut, M. Leino, N. Lumley,  
P. J. R. Mason, O. Moller, K. Nomura, M. Nyman, A. Petts, P. Peura,  
N. Pietralla, Th. Pissulla, P. Rahkila, P. J. Sapple, J. Saren, C. Scholey,  
J. Simpson, J. Sorri, P. D. Stevenson, J. Uusitalo, H. Watkins,

- and J. L. Wood,  
 "Excited states and reduced transition probabilities in  $^{168}\text{Os}$ ",  
 Phys. Rev. C 94, 044327 (2016).
16. K. Nomura, T. Niksic, and D. Vretenar,  
 "Signatures of shape phase transitions in odd-mass nuclei",  
 Phys. Rev. C 94, 064310 (2016).
17. T. Daniel, S. Kisyov, P. H. Regan, N. Marginean, Zs. Podolyak,  
 R. Marginean, K. Nomura, M. Rudigier, R. Mihai, V. Werner, R. J. Carroll,  
 L. A. Gurgi, A. Oprea, T. Berry, A. Serban, C. Nita, C. Sotty, R. Suvaila,  
 A. Turturica, C. Costache, L. Stan, A. Olacel, M. Boromiza, and S. Toma,  
 "γ-ray Spectroscopy of Low-lying Excited States and Shape Competition in  
 $^{194}\text{Os}$ ",  
 Phys. Rev. C 95, 024328 (2017).
18. G. Scamps, V.V. Sargsyan, G.G. Adamian, N.V. Antonenko, D. Lacroix,  
 "Extraction of pure transfer probabilities from experimental transfer and  
 capture data",  
 Phys. Rev. C **94**, pages 064606 (2016).
19. G. Scamps, D. Bourgin, K. Hagino, F. Haas and S. Courtin,  
 "Coupled-channels description of the  $^{40}\text{Ca}+^{58,64}\text{Ni}$  transfer and fusion  
 reactions",  
 Il Nuovo Cimento C **39**, 06, 414 (2017).
20. G. Scamps, C. Rodríguez-Tajes, D. Lacroix, F. Farget,  
 "Time-dependent mean field determination of the excitation energy in  
 transfer reactions: application to the reaction  $^{238}\text{U}$  on  $^{12}\text{C}$  at 6.14 MeV/A",  
 Phys. Rev. C **95**, 024613 (2017).

#### B) 査読無し論文

1. T. Nakatsukasa,  
 "Time-dependent density-functional calculation of nuclear response functions",  
 Proceedings of the International Conference on Nuclear Theory in the  
 Supercomputing Era - 2014 (NTSE-2014) (Pacific National University, 2016) pp.  
 15-22.

2. 柏葉 優、中務 孝,

“低密度領域における中性子星核物質の密度汎関数計算” ,

原子核研究, Vol.61 Supplement 1, 2016 年夏の学校特集号, pp. 35-36.

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. T. Nakatsukasa,

“Time-dependent density-functional theory and linear response theory”,  
Lecture in SERC School on Modern Microscopic Approaches in Nuclear  
Physics,  
Srinagar, India, May 17-June 6, 2016.

2. T. Nakatsukasa,

“Microscopic determination of reaction path, potential, and inertial mass”,  
ECT\* workshop on Towards consistent approaches for nuclear structure  
and reactions,  
Trento, Italy, June 6 - 10, 2016.

3. T. Nakatsukasa,

“Nuclear reaction path and inertial mass in the self-consistent collective  
coordinate method”,  
International Nuclear Physics Conference (INPC2016),  
Adelaide, Australia, Sep. 11 - 16, 2016.

4. T. Nakatsukasa,

“Nuclear reaction as large-amplitude collective motion”,  
Heavy-Ion Accelerator Symposium on Fundamental and Applied Sciences  
(HIAS2016),  
Canberra, Australia, Sep. 18 - 20, 2016.

5. K. Nomura,

"Shape coexistence in the microscopically guided interacting boson model",  
8th Workshop on Quantum Phase Transitions in Nuclei and Many-Body  
Systems,  
Prague, Czech Republic, 6-9 June 2016.

6. K. Nomura,

"Nuclear shapes and excitations in the microscopically-guided algebraic

theory",

Shapes and Symmetries in Nuclei: from Experiment to Theory,

Gif-sur-Yvette, France, 7-11 November 2016.

7. K. Wen,

“The Inertial Mass and Collective Path in Nuclear Fusion/Fission Reactions”,

International Conference Nuclear Theory in the Supercomputing Era – 2016 (NTSE-2016),

Pacific National University, Khabarovsk, Russia, September 19–23, 2016.

8. G. Scamps,

Gauge angle dependency in fusion and transfer reactions, restoration of broken symmetries in dynamical calculation,

IPNO, Orsay, France, 16 March 2017.

9. G. Scamps,

Microscopic description of the transfer and fusion reactions including pairing correlations,

FUSION17 conference,

Hobart, Australia, 20-24 February 2017.

10. G. Scamps,

Simultaneous description of multi-nucleon transfer and fusion reactions with the coupled channel method,

LENRT workshop,

Canberra, Australia, 15-17 February 2017.

11. G. Scamps,

Josephson effect in nuclear reactions, effect of the restoration of the gauge angle symmetry in mean-field dynamics,

CCS-RIKEN joint workshop,

Tsukuba, Japan, 12-16 December 2016.

12. G. Scamps,

Microscopic description of the transfer reaction including pairing

correlations,

HIAS Symposium,

Canberra, Australia, 18-20 September 2016.

13. G. Scamps,

Description of multi-nucleon transfer and fusion reactions with the coupled  
channel method,

INPC conference,

Adelaide, Australia, 11-16 September 2016.

**B) 一般講演**

1. T. Nakatsukasa,

“Microscopic determination of reaction path and inertial mass”,

International workshop on Recent Progresses in Nuclear Structure  
Physics 2016 (NSP2016),

Kyoto, Japan, Dec. 5-23, 2016.

2. N. Hinohara,

“FAM Applications Towards EDF Optimization”,

NUCLEI SciDAC 2016 Project Meeting,

Argonne National Laboratory, Argonne, IL, USA, Jun. 6-9, 2016.

3. N. Hinohara,

“Nuclear collective excitation modes within finite-amplitude method”,  
(poster presentation)

14th International Symposium on Nuclei in the Cosmos XIV (NIC-XIV),  
Toki Messe, Niigata, Japan, Jun. 19-24, 2016.

4. N. Hinohara and W. Nazarewicz,

“Pairing rotations in ground states of open-shell even-even deformed  
nuclei”,

Direct Reactions with Exotic Beams (DREB2016), Saint Mary’s University,  
Halifax, Canada, Jul. 11-15, 2016.

5. N. Hinohara and W. Nazarewicz,

“Binding energy differences of even-even nuclei as pairing indicators”,  
Nuclear Structure 2016 (NS2016),

Knoxville, TN, USA, Jul. 24-29, 2016.

6. N. Hinohara,  
“Neutron-proton superfluid DFT”,  
DOE topical collaboration meeting “Nuclear Theory for Double-Beta Decay  
and Fundamental Symmetries”,  
Facility for Rare Isotope Beams, Michigan State University,  
East Lansing, MI, USA, Aug. 1-2, 2016.
7. N. Hinohara and W. Nazarewicz,  
“Pairing Nambu-Goldstone modes and binding-energy differences of  
even-even nuclei” (poster presentation),  
International Nuclear Physics Conference (INPC2016),  
Adelaide, Australia, Sep. 11-16, 2016.
8. N. Hinohara,  
“New pairing observable: binding energy differences of even-even nuclei”,  
First Tsukuba-CCS-RIKEN joint workshop on microscopic theories of  
nuclear structure and dynamics,  
Tsukuba, Japan, Dec. 12-16, 2016.
9. N. Hinohara,  
“Recent theoretical developments of finite-amplitude method for QRPA”,  
Recent Progresses in Nuclear Structure Physics (NSP2016),  
Kyoto, Japan, Dec. 5-23, 2016.
10. Y. Hashimoto,  
“Gogny-TDHFB calculation of  $^{20}\text{O} + ^{20}\text{O}$  head-on collision”,  
First Tsukuba-CCS-RIKEN joint workshop on microscopic theories of  
nuclear structure and dynamics,  
Wako & Tsukuba, Japan, Dec.12-16, 2016.
11. K. Washiyama, T.Nakatsukasa,  
“Multipole modes of deformed superfluid nuclei with the finite amplitude  
method in three-dimensional coordinate space”,  
SSNET Workshop 2016,  
Gif-sur-Yvette, France, Nov.7-11, 2016.
12. K. Washiyama, T.Nakatsukasa,  
“Finite amplitude method for QRPA in three-dimensional coordinate”,  
First Tsukuba-CCS-RIKEN joint workshop on microscopic theories of

nuclear structure and dynamics,

Wako & Tsukuba, Japan, Dec.12-16, 2016.

13. K. Washiyama,

"Fusion hindrance in heavy systems with time-dependent Hartree-Fock",

International Conference on heavy-ion collisions at near-barrier energies  
(FUSION17),

Hobart, Australia, Feb. 20-24, 2017.

14. K. Washiyama,

"Present status of three-dimensional finite-amplitude-method QRPA",

2nd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model,  
Sado, Japan, Aug.21-23, 2016.

15. F. Ni, T. Nakatsukasa,

"Self-consistent Collective Coordinate in Richardson model",

First Tsukuba-CCS-RIKEN joint workshop,  
Tsukuba, Japan, Dec. 12-16, 2016.

16. F. Ni,

"Pairing dynamics in Richardson model",

NIC-XIV School 2016,  
Niigata, Japan, June 13-17, 2016

17. F. Ni,

"Collective coordinates in Richardson model",

2nd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model,  
Sado, Japan, Aug.21-23, 2016.

18. Y. Kashiwaba, T. Nakatsukasa,

"Density functional calculations for the neutron star matter at subnormal  
density",

2nd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model,  
Sado, Japan, Aug.21-23, 2016.

19. T. Saito,

"Numerical calculation of giant quadrupole resonance",

2nd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model,

Sado, Japan, Aug.21-23, 2016.

20. K. Yaoita,

“Coriolis effect for vibrational bands in transitional nuclei”,

2nd workshop on many-body correlations in microscopic nuclear model,

Sado, Japan, Aug.21-23, 2016.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 中務 孝、

“原子核の形と対称性の破れ”、

日本物理学会科学セミナー、

東京大学駒場キャンパス、東京、2016 年 8 月 20-21 日

#### B) その他の発表

1. 中務 孝、

“核構造計算による核反応モデルの高精度化”、

ImPACT 藤田プログラム全体会議、

J S T 別館、東京、2016 年 10 月 13-14 日.

2. 中務 孝、

“核構造計算による核反応モデルの高精度化”、

ImPACT 藤田プログラム全体会議、

J S T 別館、東京、2017 年 3 月 24-25 日.

3. 日野原 伸生、

“偶々核の束縛エネルギー差と対回転モード”、

日本物理学会 2016 年秋季大会、

宮崎大学、2016 年 9 月 21-21 日.

4. 日野原 伸生、

“二重ベータ崩壊の原子核行列要素と中性子陽子対の非線形ゆらぎ”、

千葉大学原子核理論セミナー、

千葉大学西千葉キャンパス、2016 年 11 月 24 日.

5. 日野原 伸生、



- “対相関と二重束縛エネルギー差”、  
研究会「クラスター・平均場の両側面からみる原子核構造の多様性とそのダイナミクス」、  
大阪市立大学杉本キャンパス、2017 年 1 月 19-20 日.
6. 日野原 伸生, Markus Kortelainen, Witold Nazarewicz,  
“原子核エネルギー密度汎関数の最適化に向けた巨大共鳴の効率的評価”、  
日本物理学会第 72 回年次大会、  
大阪大学、2017 年 3 月 17-20 日.
7. 橋本幸男、  
“Gogny-TDHFB 法による  $^{20}\text{O} + ^{20}\text{O}$  の計算における摩擦係数について”、  
日本物理学会第 72 回年次大会、  
大阪大学、2017 年 3 月 17-20 日.
8. 鷲山広平、中務孝、  
“3 次元有限振幅法 QRPA の非軸対称原子核への応用”、  
日本物理学会秋季大会、  
宮崎大学、2016 年 9 月 21-24 日.
9. 鷲山広平、中務孝、  
“3 次元 QRPA に対する有限振幅法の開発と応用”、  
日本物理学会第 72 回年次大会、  
大阪大学、2017 年 3 月 17-20 日.
10. 倪放、中務孝、  
“対相関ダイナミクスを記述する集団座標”、  
クラスター・平均場の両側面からみる原子核構造の多様性とそのダイナミクス、  
大阪市立大学、2017 年 1 月.
11. 倪放、中務孝、  
“ $0^+$ 対励起状態を記述する集団座標と四重極相関”、  
日本物理学会 2016 年秋季大会、  
宮崎大学、2016 年 9 月.
12. 柏葉 優、中務 孝、  
“中性子星内殻におけるスラブ相に対する完全自己無撞着計算”、

日本物理学会春季第 72 回年次大会,  
大阪大学, 2017 年 3 月 17-21 日.

13. 八百板 恭介、中務 孝、

“5 次元四重極集団ハミルトニアンを用いた回転バンド間 E2 遷移の研究”、  
日本物理学会第 72 回年次大会、  
大阪大学、2017 年 3 月 17-20 日.

#### (4) 著書、解説記事等

1. N.Takigawa, K.Washiyama,

“Fundamentals of Nuclear Physics”, Springer Japan (2017)

### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

#### 【国際連携】

1. ポーランド・ワルシャワ工科大学の原子核理論グループと共同で、実空間 TDHFB 計算 (中務)
2. 米国ノースカロライナ大学の Engel 教授と二重ベータ崩壊の核行列要素に関する共同研究 (日野原)。
3. 米国ミシガン州立大学 Nazarewicz 教授およびフィンランド・ユバスキュラ大学の Kortelainen 研究員と原子核密度汎関数の諸問題に関する共同研究 (日野原)
4. 米国 SciDAC project “Nuclear Computational Low-Energy Initiative (NUCLEI)”、外国人共同研究者として参加 (日野原)
5. クロアチア・ザグレブ大学の理論グループと、奇核の構造に関する共同研究 (野村)
6. スペインマドリード自治大学およびクウェート大学と、形状相転移と変形共存に関する共同研究 (野村)
7. 英国サリー大学、ドイツケルン大学をはじめとした、欧州の複数の研究機関の実験グループと、中重核分光に関する共同研究 (野村)

### 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 国際会議 Nuclear Structure 2016 (NS2016) Conference (Knoxville, TN, USA, July 24-29, 2016) の国際諮問委員を務めた (中務)。

2. 国際ワークショップ Tsukuba-CCS-RIKEN joint workshop on microscopic theories of nuclear structure and dynamics (Wako and Tsukuba, December 12-16, 2016) の組織委員を務めた (矢花、中務、橋本、日野原 (委員長) )。

## 9. 管理・運営

中務 孝

計算科学研究センター 原子核物理研究部門 部門主任  
計算科学研究センター 運営委員会委員  
計算科学研究センター 人事委員会委員  
計算科学研究センター 運営協議会委員  
計算科学研究センター 共同研究委員会委員長  
計算科学研究センター 学際計算科学連携室員  
数理物質系物理学域 運営委員会委員  
数理物質系物理学域 原子核理論グループ長  
数理物質系物理学域 評価委員  
数理物質系物理学域 理論グループ副議長

## 10. 社会貢献・国際貢献

中務 孝

高校生対象模擬授業、2016. 8. 1、筑波大学計算科学研究センター  
JAEA タンデム専門委員会委員  
JAEA 黎明研究評価委員会委員  
Editor for Journal of Physical Society of Japan  
Editor for International Journal of Modern Physics E  
核理論委員会委員  
日本物理学会 理論核物理領域・領域代表  
高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・運営会議議員  
雑誌「原子核研究」編集委員  
計算基礎科学連携拠点運営委員 (ポスト京重点課題)

## 11. その他

海外長期滞在

1. 日野原伸生,

National Superconducting Cyclotron Laboratory,

Michigan State Univ., East Lansing, MI, USA, 2016 年 4 月 1 日～8 月 30 日

2. 野村昂亮

University of Zagreb, Croatia, 2016 年 4 月 1 日 ～ 2017 年 3 月 31 日

## IV. 量子物性研究部門

### 1. メンバー

教授	矢花 一浩
准教授	小野 倫也、小泉 裕康、全 暁民
講師	前島 展也
研究員	植本 光治、佐藤 駿丞
学生	大学院生 8 名
教授	日野 健一(学内共同研究員、物質工学域)
	岡田 晋(学内共同研究員、物理学域)
	押山 淳(客員教授、東京大学大学院工学系研究科)

### 2. 概要

本部門は、計算物質科学のいくつかの分野にわたる研究を行なっているが、特に光科学に関係した計算物質科学研究に特色を有している。時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) に基づく固体中の電子ダイナミクスや光応答の計算、時間依存シュレディンガー方程式に基づく原子や分子と光の相互作用、強相関電子系の光応答など、様々な物質を対象とした光科学分野の計算科学研究を行なっている。また、界面の伝導特性に対して第一原理に基づく解析を進めており、SiC-MOSFET 開発に用いる界面の電子状態とキャリア散乱特性の計算を行った。強相関電子系に関しては、銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構に関連して電子のスピン自由度をつかった新奇な電気伝導のメカニズム解明と、それを量子ビットとした量子コンピュータの実現を目指した理論研究も行っている。

### 3. 研究成果

#### 【1】パルス光からガラスへの超高速エネルギー移行 (佐藤、矢花)

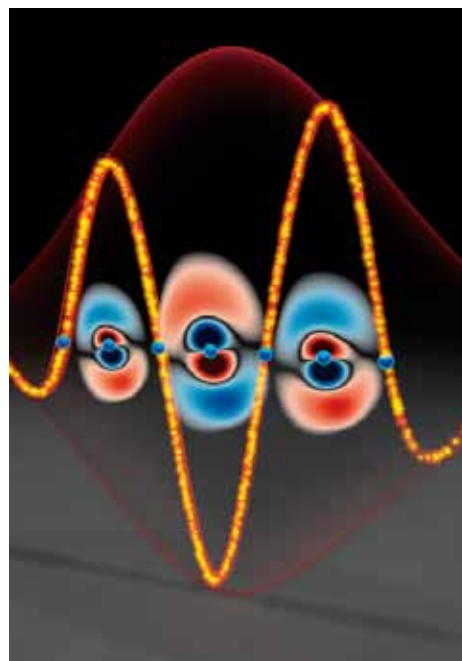
本部門では、時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) に基づく電子ダイナミクスの第一原理計算と、パルス光の電磁場を記述するマクスウェル方程式を多階層で連結したシミュレーション法を独自に開発し、高強度超短パルス光と物質の相互作用に関する先端の光科学研究を展開している。本研究は、高強度超短パルスレーザーから透明物質の電子へ、光の 1 周期よりも短い時間スケールでエネルギーが移行する過程を、マックスプランク量子光学研究所のアト秒科学実験グループと協力して解明したものである。

実験は Fused Silica、計算は  $\alpha$  クォーツ (共に  $\text{SiO}_2$ ) の  $10\ \mu\text{m}$  の薄膜に対して、平均振動数  $1.55\text{eV}$  の数サイクルの高強度超短パルスレーザーを照射する。測定と計算を直接比較することのできる量の一つは、薄膜を透過したパルス光の波形そのものである。実験的にはア

ト秒ストリーキングの方法を用いて計測され、計算では直接透過波の波形を求めることができる。破壊閾値に近い強度のパルスレーザーに対して、測定と計算は共にパルス波形の変化は小さく、両者で変化の傾向（包絡形状と位相）は定性的に一致することが示された。実験で得られたパルス波形変化から、薄膜の中央においてパルス光から物質電子へのエネルギー変化を得ることができ、これをシミュレーションの結果と比較した。その結果、ある強度領域の極めて小さい強度の範囲で、パルス光から物質電子へのエネルギー移行が急激に増大することが示された。その域値は、実験と計算で良く一致している。この結果は透明材料のレーザー加工初期過程で起こる光から物質へのエネルギー移行を初めて直接捉えたものとして、注目される。

本研究の成果を含む論文 A. Sommer et.al, Nature 534, 86-90 (2016)の出版時にプレスリリースを行なった（2016 年 5 月 20 日）。

図 1：左から来る黄色い光が二酸化ケイ素の原子に照射し、各原子の周りにいる電子を振動させる。この電子の動きが光波のエネルギーを吸収する。パルス光の終わりで、電子による吸収されたエネルギーは再び光波に戻る。この物質を通過した後の光波の時間波形を正確に測定し、アト秒の速さで変化する固体の電子の運動を、実時間観測することが可能になった。



## 【2】光サイクル以下の時間スケールで起こるダイヤモンド光応答の超高速変化（佐藤、矢花）

電子ダイナミクスに対する TDDFT 計算と光電磁場に対するマクスウェル方程式を組み合わせた第一原理計算を用い、チューリッヒ工科大学のアト秒実験グループと協力して、ダイヤモンドに数サイクルのパルス光を照射した時に、光の 1 サイクルよりも短い時間スケールでダイヤモンドの光応答（誘電関数）が変化することを示した。

実験と第一原理シミュレーションはともに、50nm の厚さを持つダイヤモンド薄膜に平均振動数 1.55eV、数サイクルの高強度パルス光をポンプ光として照射し、それと時間差を制御した平均振動数が 40eV 程度のアト秒プローブパルス光を照射して、ポンプ光電場がダイヤモンドの 40eV 近傍の領域に引き起こすプローブ光吸収率の変化を調べた。測定とシミュレーションにより、光電場の大きさに依存して吸収が変化する様子を明らかにすることができた。

シミュレーションの内容を分析することにより、この吸収率の変化が動的フランツ・ケルディッシュ効果によることがわかった。フランツ・ケルディッシュ効果は、バンドギャップ

を持つ誘電体に静電場を印加した時に、電子のトンネル効果によりバンドギャップ以下のエネルギーで光吸収が起こる現象である。本研究は数フェムト秒で振動する電場を照射した場合でも、それに起因する電子運動が誘電率の超高速変化をもたらすことを示したものであり、この結果は将来の光波を用いた新奇なエレクトロニクスの実現に向けて、重要基礎的知見を与えるものである。

本研究の成果を含む論文 M. Lucchini et.al, Science 353, 916-919 (2016)の出版時にプレスリリースを行なった（2016 年 8 月 26 日）。

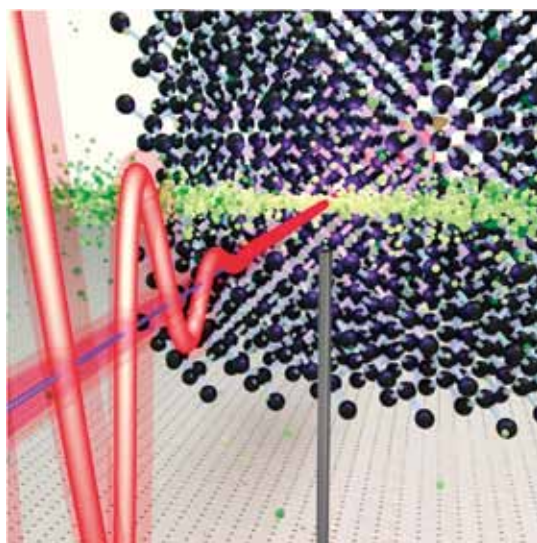


図 2：ダイヤモンドの薄膜にレーザーパルスを照射する様子。

### 【3】電子ダイナミクス計算コード ARTED の開発（植本、佐藤、矢花、廣川（システム情報工学研究科）、朴（高性能計算システム研究部門））

我々のグループで独自に開発を進めてきた時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理電子ダイナミクス計算コード ARTED (Ab-initio Real-Time Electron Dynamics simulator)が多様な計算機において高速に動作するよう、アプリ開発者とシステム研究者との密接な協力によるチューニングを進めた。ARTED は、平成 26 年度の HPCI による「京」コンピュータの一般利用において、最も高い実効性能を持つアプリと認定され表彰された。また、筑波大学と東京大学が共同で運用を開始したメニーコアスパコン Oakforest-PACS を高効率で利用できるよう、Intel Xeon Phi の Knights Landing プロセッサに対するチューニングを進めた。

ARTED を始めとする電子ダイナミクス計算コードを整備して、光科学分野において有用な第一原理ソフトウェアを開発・応用することを目指す CREST 研究「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」（代表：矢花一浩）が、平成 28 年 10 月よりスタートした。この課題は、分子科学研究所の信定グループとの密接な協力を予定しており、分子研ではナノ構造体における電子ダイナミクスを計算するコード GCEED を開発している。CREST 研究の開始を機会に、ARTED と GCEED を統合し、固体からナノ構造までを対象とするソフトウェア SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience)を開発することを決め、準備作業を進めた。

### 【4】光電磁場と電子ダイナミクスを結合した超大規模計算の試み（植本、佐藤、矢花、廣川（システム情報工学研究科）、朴（高性能計算システム研究部門））

Oakforest-PACS の試験期間に、同スパコンの全ノードを用いて ARTED による光・電子ダイナミクス超大規模計算を行う機会を得た。これまで光電磁場のマクスウェル方程式と

TDDFT による電子ダイナミクス計算では、電子ダイナミクスは常に 3 次元であるが光伝播に関しては 1 次元計算に限られていた。この全ノードを使用できる機会を利用して、光電磁場を記述するマクスウェル方程式が 2 次元及び 3 次元となる場合について計算を行った。2 次元の場合には光渦を伴う入射パルス光とグラファイト、シリコン表面の相互作用を、3 次元の場合にはシリコンからなるナノピラーや平面状に配置したナノ球体とパルス光の相互作用に関する計算を行った。両者の場合とも、多数のノードを用いた場合にも高いスケーリングを示し、高効率な計算が行えることを確認した。

#### 【5】グラファイト薄膜の非線形光応答計算（植本、矢花）

グラファイトに超短パルス光を照射した際に起こる、光から電子へのエネルギー移行を調べた。グラファイトの単層からなるグラフェンでは 2 次元バンド構造を反映し、非線形光応答の一種である可飽和吸収が顕著に現れることが知られており、すでに超短パルスレーザー発振に応用されている。我々はグラファイトに対して時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理計算を行い、パルス電場から電子へのエネルギー移行の様子を調べた。その結果、 $10^{10}$ - $10^{12}$  W/cm<sup>2</sup> 程度の限られた強度範囲で、パルスの時間長を増してもエネルギー移行が増大しないことが見出された。このエネルギー移行の飽和現象を理解するため、印加した電場と誘起された電流の関係を調べたところ、半金属であるグラファイトでは通常はオームの法則が成立するが、飽和が起こる強度ではパルス電場が照射する途中で、オームの法則の成り立つ領域から反オーム応答へと変化する、またより高い強度では絶縁体応答へと変化する様子が見出された。これらは、可飽和吸収現象のメカニズムの理解や、炭素材料に対する非熱レーザー加工の初期過程を理解する上で有用な知見を与えるものである。本研究は、株式会社 IHI との共同研究として行なっている。

#### 【6】固体非線形光応答の実時間・実空間分析（植本、佐藤、矢花）

物質の摂動的な非線形応答を調べる第一原理計算手法として、時間依存密度汎関数理論の実時間計算に基づく方法を、昨年度に引き続き検討した。結晶の単位セルに、波形が等しく強度のみ異なるパルス電場を複数照射した時の電流や電子密度変化を求め、数値的な差分により 2 次、及び 3 次の非線形応答を得る方法である。

#### 【7】第一原理計算コード RSPACE の開発（小野）

超並列計算機での計算に適した実空間差分法に基づく第一原理電子状態・伝導特性計算法とこの方法に基づく計算コード RSPACE を開発している。RSPACE を様々な系の計算に利用していくには、計算の高速化することと擬ポテンシャルの種類を増やしていくことが重要である。今年度は、バンド並列計算部の並列化チューニングと他コードで使われている擬ポ



テンシタル変換コードの組み込みを行った。また、28 年度 12 月より運用を開始した Oakforest-PACS に合わせたコード改良とチューニングを行い、メニーコアシステムでの高速シミュレーションを可能にした。

### 【8】SiC-MOSFET 開発における界面電子状態シミュレーション（小野）

SiC を用いたパワーデバイスには、エネルギー問題の解決や国内半導体デバイス産業の復興に向け、大きな期待が寄せられている。しかし、SiC-MOS 界面でのキャリア移動度が SiC バルクに対して 10%程度しかなく、Si バルクに対して 90%以上を誇る Si-MOS に比べ、深刻な欠点となっている。したがって、SiC パワーデバイスの普及には、移動度の向上が急務である。これまで、SiC-MOS 界面の欠陥準位によるキャリア散乱が移動度低下の原因であることが実験的研究より示唆されている。しかし、どのような界面欠陥がキャリアを散乱するのかは定性的な議論しかなく、詳しいことは分かっていない。SiC-MOS の移動度の向上のためには、界面の電子状態を理解し、制御する必要がある。

本年度は、SiC-MOS 界面の原子構造とキャリア散乱特性の関係を、RSPACE を用いて評価した。まず、熱酸化過程のシミュレーションをもとに、図 3 に示すような計算モデルを用いて、酸化中に現れる原子構造がキャリア散乱に与える影響を調べた。パワーデバイスによく用いられる 4H-SiC は、積層構造に関係した h 面、k 面と呼ばれる最表面層が交互に現れる。そして、h 面を最表面に持つ界面は、伝導帯端に自由電子的な振る舞いをする特徴的な準位を持ち、その電子状態は、酸化による酸素原子侵入により顕著に変わることが昨年度までの研究で分かっている。図 4 に示すように、h 面では、酸化による界面への酸素原子侵入を起因とするキャリア散乱が k 面に比べて大きいことを第一原理電気伝導計算で明らかにした。SiC/SiO<sub>2</sub> 界面には、格子間炭素原子やカルボニル基を原因とする界面欠陥も存在する。

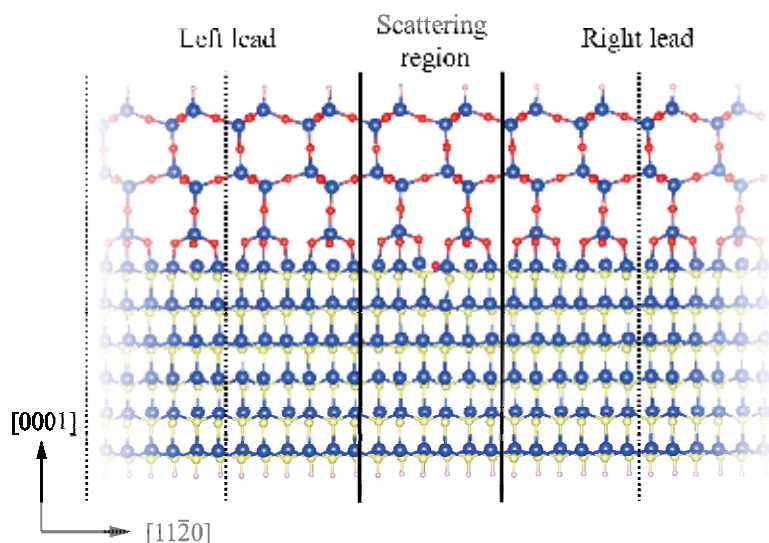


図 3: SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の電気伝導特性計算モデル。文献[6]より。

図 4 に示すように、 $h$  面での酸素原子侵入によるキャリア散乱は、界面欠陥準位を作る界面欠陥と同程度にキャリアを散乱することが分かった。この結果は、Si デバイスでは散乱因子として考えられてこなかった欠陥準位を作らない電気的に不活性な欠陥でも、SiC デバイスでは界面欠陥準位を作る活性な欠陥と同程度にキャリアを散乱することを示すものである。

この結果は、 $n$  チャネル SiC-MOSFET によく使われる SiC(0001)面の電子移動度を制限するメカニズムの一つであると予想される。現在、筑波大パワエレ研・産総研の実験グループと協力して、高い移動度を実現する界面構造の探索を進めている。

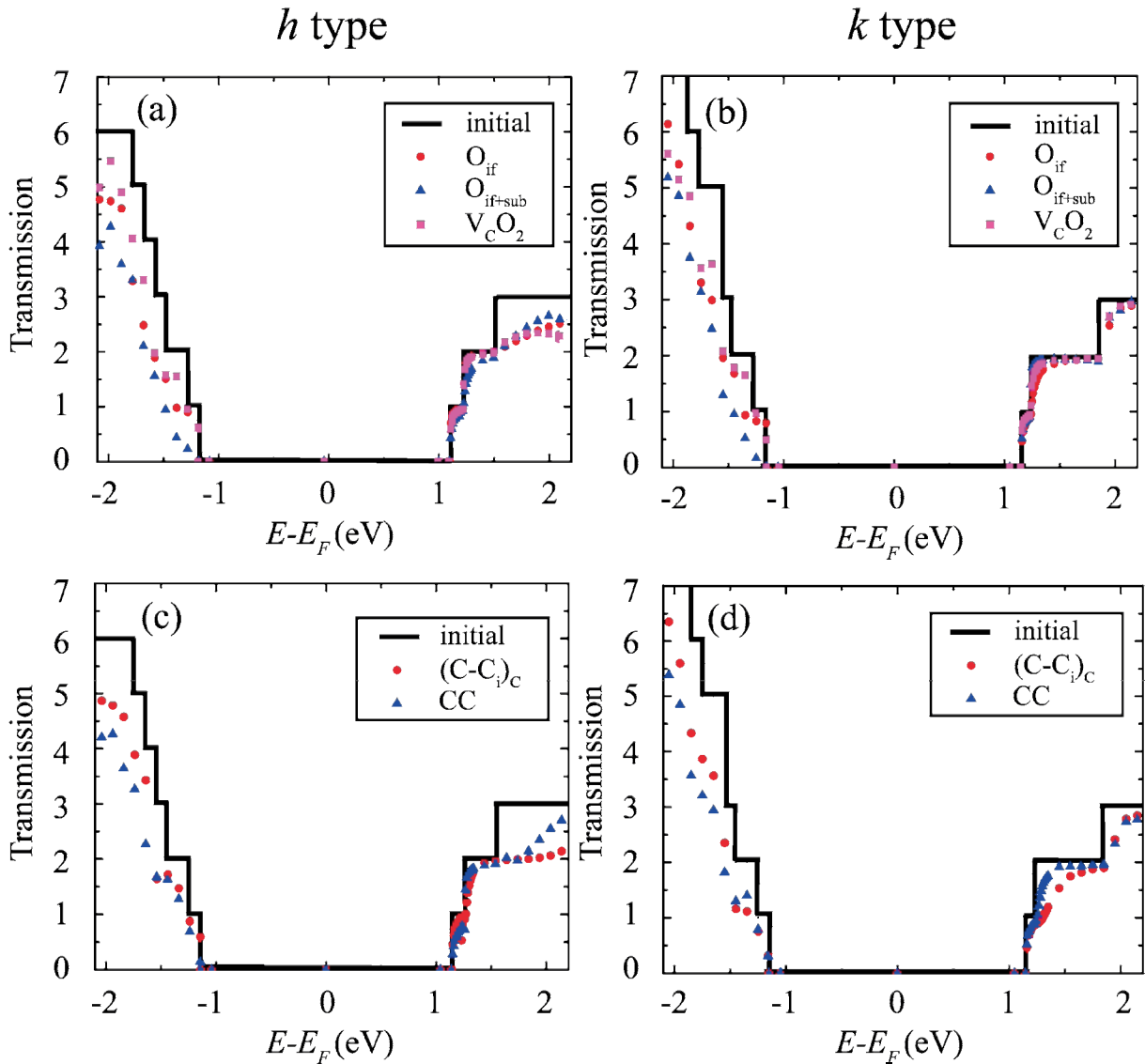


図 4 : 界面のキャリア散乱特性の比較。(a)  $h$  面に酸素原子が侵入した界面。(b)  $k$  面に酸素原子が侵入した界面。(c)  $h$  面に欠陥ができた界面。(d)  $k$  面に欠陥ができた界面。酸素侵入や欠陥生成の無い界面(initial)、酸素原子 1 個侵入( $O_{if}$ )、2 個侵入( $O_{if+sub}$ )、3 個侵入後 CO 分子放出( $V_C O_2$ )、格子間炭素原子欠陥( $(C-C_i)_C$ )、カルボニル基欠陥(CC)。透過確率の initial から減少幅が大きい界面ほどキャリアの散乱が多い。文献[6]より。

## 【9】銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構解明に向けた研究(小泉)

- (1) ホールの周辺にラシュバ型スピン軌道相互作用が存在するとした場合のスピン渦誘起ループ電流の安定(小泉、若浦、森崎)

銅酸化物高温超伝導は、母物質である反強磁性絶縁体にホール（または、電子）をドーピングしたときに生じる。超伝導状態でも磁性は残っており、その磁気モーメントは、母物質と同様に  $\text{CuO}_2$  面内に寝ていると考えられる。この  $\text{CuO}_2$  面内の磁気モーメントは遍歴電子のスピンに由来し、そのスピンモーメントはスピン渦を作り、スピン渦により、スピン渦誘起ループ電流が発生していると、我々は考えている。この面内に寝たスピンモーメントを説明するために我々は、ホールの周辺にラシュバ型スピン軌道相互作用が存在すると仮定した。

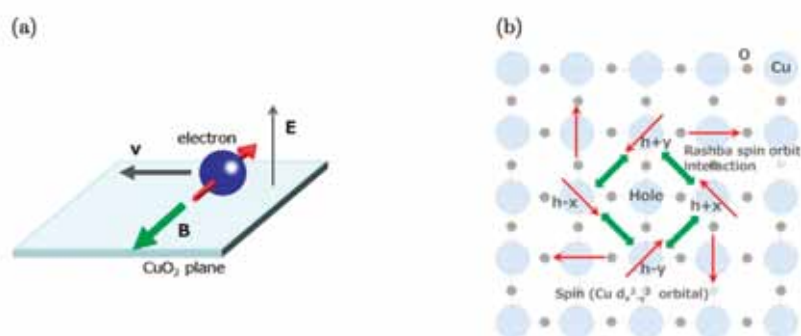


図 5 : (a)銅酸化物  $\text{CuO}_2$  面の Rashba 相互作用による、有効磁場  $\mathbf{B}$   
(b) ホールの周辺のスピン渦とスピン渦誘起ループ電流の Rashba 相互作用による安定化。  
内部電場が  $\text{CuO}_2$  面に垂直な場合、スピンの  $\text{CuO}_2$  面内に寝た方が安定化する。

図 5 にラシュバ相互作用により、スピンの  $\text{CuO}_2$  面内に寝る様子を模式的に描いてある。面内を移動する遍歴電子と面に垂直な内部電場により、有効磁場が面内に働き、スピンを面内に寝せる様子が描かれている。これにより遍歴電子がホールのまわりをまわっている状態では、 $\text{CuO}_2$  面内に寝たスピンモーメントをもったスピン渦が安定化される。

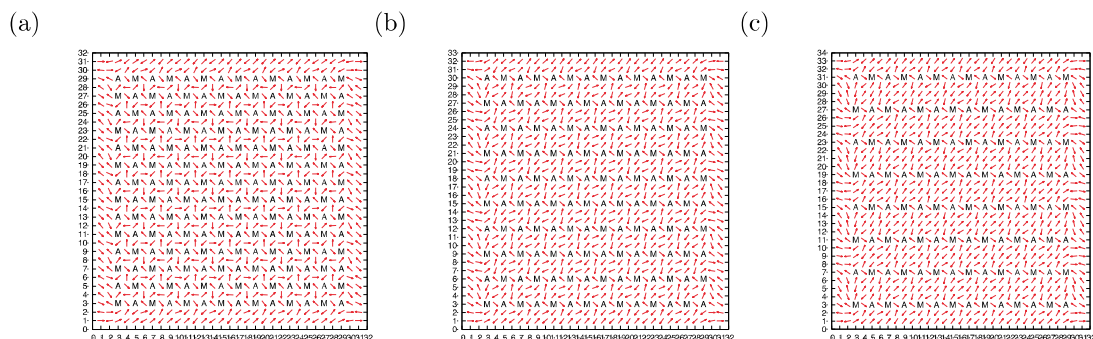


図 6 : (a)4x4 の spin-vortex-quartet (SVQ)を敷き詰めた場合のスピンの様子。ホール濃度  $x=1/4$  に相当。(b) 4x6 の spin-vortex-quartet (SVQ)を敷き詰めた場合のスピンの様子。ホ

ール濃度  $x=1/6$  に相当。(c)  $4 \times 8$  の spin-vortex-quartet (SVQ) を敷き詰めた場合のスピンの様子。ホール濃度  $x=1/8$  に相当。

我々は、 $\text{CuO}_2$  面を、スピン渦を 4 つ含む spin-vortex-quartet (SVQ) で敷き詰めた場合を考察した。SVQ としては、 $4 \times 4, 4 \times 6, 4 \times 8$  を採用し(図 6 の(a), (b), (c) にそれぞれ対応)、モンテカルロシミュレーションを行い、超伝導転移温度を求めた。その結果、図 7 のように実験で得られている ホール濃度  $x=0.16$  付近でピークを持つ構造が得られた。同様の転移温度は、Rashba 効果を取り入れなくても得られていたが、ピーク構造は、Rashba 効果を取り入れたことにより再現された。

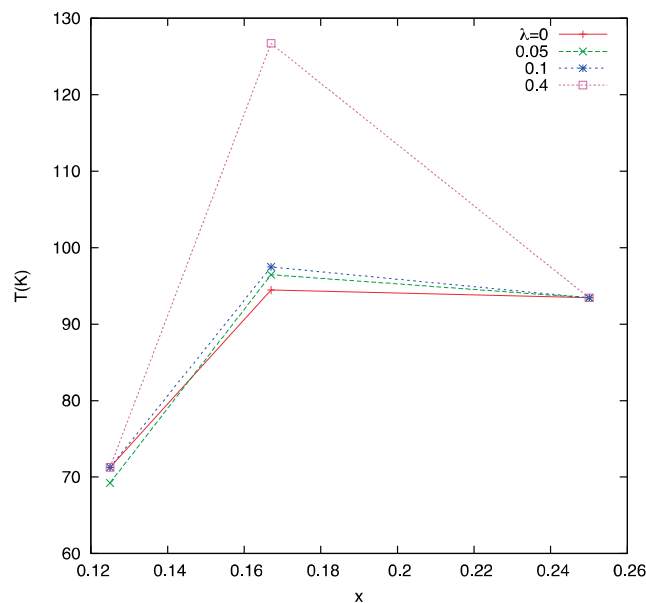


図 7 : モンテカルロシミュレーションによる求めた超伝導転移温度とホール濃度の関係。ホール濃度は、図 6 に対応。 $\lambda$  は Rashba 相互作用のパラメータである。温度は、transfer integral  $t=130$  meV として求めた。

## (2) 銅酸化物における U(1) インスタントンの生成 (小泉)

我々は、銅酸化物高温超伝導機構としてナノサイズの安定なループ電流、“スピン渦誘起ループ電流”による超伝導生成機構を提出しているが、この理論では、銅酸化物のバルクでは、ドーパされたホールがスモールポーラロン化し、ほとんど動かないと仮定している。この時、 $\text{CuO}_2$  面の遍歴電子の状態は電子が移動できるサイトの数と電子数が等しい有効ハーフフィリング状態となり、1 電子状態は、占有された下部ハバードバンドと空の上部ハバードバンドからなるバンド絶縁体状態となる。“スピン渦誘起ループ電流”状態は、このバンドギャップの間に存在する。スピン渦誘起ループ電流は、遍歴電子がスピン渦をつくり、その

遍歴運動がスピンの回転を伴ったものであるときに生じる。このときエネルギーの最小化で求めた波動関数は座標についての多価関数となり、そのままでは、波動関数が満たすべき一価関数の条件を満たさない。波動関数の一価性の要請から、波動関数には、一価性を回復する位相因子が付け加わり、この位相因子は、トポロジカルな pure ゲージポテンシャル、‘U(1) インスタントン’ を生成する。QCD では、インスタントンによる U(1)ゲージ場の質量の起源が提案されているが、銅酸化物においても、この‘インスタントン’が U(1)ゲージ場の質量の起源と考えることができることを指摘した。

#### 【10】銅酸化物高温超伝導体を使った量子コンピュータ実現に向けた研究（小泉）

量子コンピュータ実現のためには、量子ビットが Di Vincenzo が提出した、5つの条件 1) 初期化可能性、2) 観測可能性、3) ゲート演算の可能性、4) デコヒーレンス時間がゲート演算時間よりも十分長い、5) 集積化可能性、を満たさなければならない。スピン渦誘起ループ電流量子ビットに対して2量子ビット系という小さな系ではあるが、理論的なシミュレーションで、4)以外のすべての条件を満たし得ることが示された（若浦光、博士論文「スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子計算機に関する理論的研究」）。4)についてもスピン渦誘起ループ電流はトポロジカルに保護されていることを考えると、おそらく満たすと考えられる。しかし、今後、実験的な検証が必要である。

#### 【11】2色円偏光強レーザー場による電離電子再散乱過程の制御（全）

強レーザー場における電子の再散乱過程は様々な物理現象（例えば、高次高調波の生成や多光子電離）の起因と見られている。線偏光レーザー場における再散乱電子の向きは1次元であるので、運動の向きは制御できない。本研究では2色円偏光レーザーの強度と偏光の向きを利用して、再散乱電子の運動を2次元平面内で図8のように制御できた。その研究結果は実験グループとの共同研究成果として Phys. Rev. A に発表した。



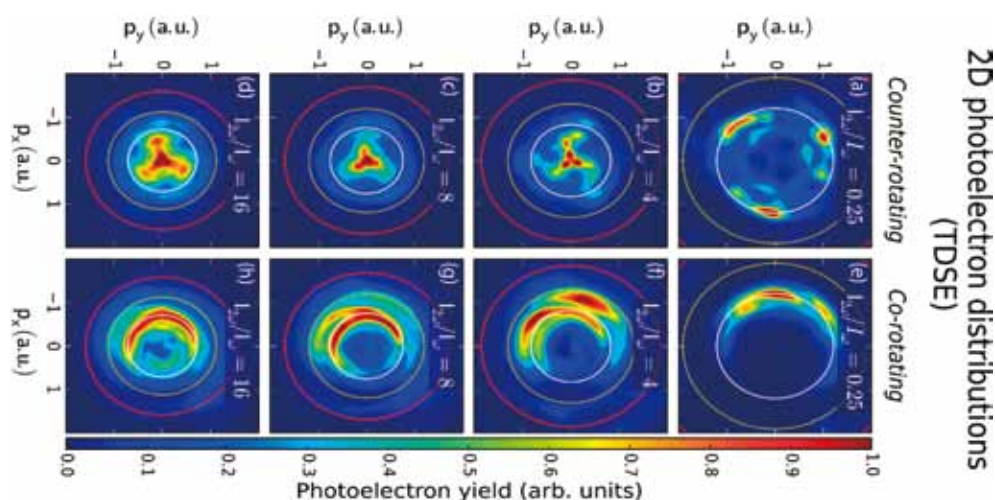


図 8：レーザー電場偏向平面における電離電子の運動量分析とレーザー強度の関係。上の図では 2 色レーザーの偏向は下向き、下の図では 2 色レーザーの偏向は同じ方向である。

### 【1 2】単パルス強レーザー強度測定方法の開発（全）

強レーザー場における物理過程は非線形過程というもので、産出量は強度に敏感に依存することがよく知られている。しかし、従来のレーザー強度測定方法は実験で測定された電離確率と簡単なモデルでの予測量とを比べて推測するので、強度の測定精度は 10% 以上である。産出量のそれは数倍から数十倍でもおかしくないということである。そして、より精度の高い強度測定方法は強レーザー場研究分野の急務となっている。我々は大量な強レーザー場における水素原子電離確率を第一原理の理論計算で得て、実験結果と比べることにより、強度 2 % 以下の測定方法を開発した。その結果は実験グループとの共同研究成果として物理分野で有名な雑誌 Phys. Rev. Lett に発表した。

### 【1 3】半導体・強相関電子系におけるレーザー誘起ダイナミクス（前島）

半導体超格子に DC 電場および CW レーザーを照射した場合に発現する dynamical Wannier-Stark ladder (DWSL) における状態密度 (DOS) レーザー強度依存性を R-matrix 伝播法により解析した。DC 電場による Bloch 周波数  $\omega$  と CW レーザーの周波数  $\Omega$  の比  $\eta = \Omega/\omega$  が分数となる場合に、新奇な共鳴状態の発生を意味するピーク構造が状態密度に現れることを示した (図 9)。また、バルク半導体にパルスレーザーを照射した場合に出現するコヒーレントフォノン状態とそれによるコヒ

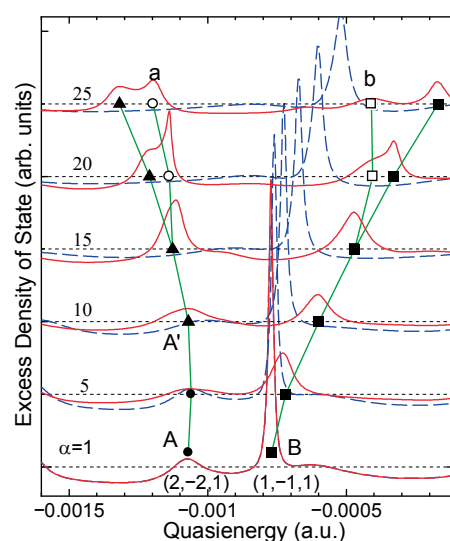


図 9：DWSL( $\eta = \Omega/\omega = 3/2$ ) の状態密度 (DOS) に現れるピーク構造 (a, b)。

ーレント振動現象についてボゾン化法に基づく解析的・数値的方法により調べた。パルスレーザー照射により発生する光キャリアによるプラズモン状態と音響フォノンが共鳴することによる不規則な振動現象が生じることを明らかにした。また、低次元強相関電子系の理論模型の一種であるイオン性ハバード模型の動的構造因子を厳密対角化などにより数値的に調べ、本来は電荷励起状態を観測する量である動的電荷構造因子にスピン励起状態のスペクトルピークが現れることを示した。

#### 4. 教育

##### 博士論文

若浦 光 スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子計算機に関する理論的研究

##### 修士論文

横井浩太 1 次元拡張イオン性ハバードモデルの低エネルギー領域における光励起状態の理論的研究

森崎 翼 銅酸化物超伝導体におけるスピン渦誘起ループ電流とラッシュバスピ軌道相互作用の効果

##### 卒業論文

牟田純志 1 次元拡張イオン性パイエルスーハバード模型におけるスピンソリトン状態の解析

出口泰資 レーザー場中のハバード梯子模型におけるフロケ状態の解析

林田伸明 コヒーレントフォノン生成機構における初期位相のパルス条件依存性

市川大晶 遺伝算法で 2 次元スピン系 Honey Comb エネルギー構造の理論計算

飯山博紀 中赤外線レーザーによる X-線レーザー生成メカニズムの理論研究

#### 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

##### 【1】 受賞

1. 平成 27 年度 HPCI 優秀成果賞。「京」の一般利用課題「極限的パルス光と物質の相互作用を記述するマルチスケール第一原理計算」（研究代表：矢花）が、一万ノード以上の大規模計算において「京」の実効性能を最も引き出した課題と認定された。

##### 【2】 外部資金

1. 科研費基盤研究(B)、矢花一浩、代表、2015-2018 年度、3300 千円（2016 年度直接経費）「第一原理計算に基づく極限パルス光と物質の相互作用の解明」
2. ポスト京重点課題 7「サブ課題 B「光・電子融合デバイス」、矢花一浩、分担、2016-2020 年度、7469 千円（2016 年度直接経費）、「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」

3. JST CREST、矢花一浩、代表、2016-2021 年度、7500 千円（2016 年度直接経費）、  
「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」
4. 共同研究経費、株式会社 IHI、450 千円（2016 年度直接経費）「時間依存第一原理解析によるフェムト秒レーザと物質との相互作用に関する研究」
5. Delta ITP funds (オランダ)、小泉裕康、2016 年度、研究代表者、21,175 ユーロ、  
「Theory of high temperature superconductivity and strongly correlated system」
6. 日本学術振興会、基盤研究(C)、全曉民（トンショウミン）、代表、2016 年度、2860 千円、  
「2 色円偏光レーザー場における原子・分子電離過程の解明と制御」
7. 科学技術振興機構、戦略的創造研究推進事業・さきがけ、小野倫也、代表、2013 年度より継続、6630 千円、「計算科学的手法による省電力・低損失デバイス用界面のデザイン」
8. 科学技術振興機構、先導的物質変換領域、小野倫也、分担、2012 年度より継続、0 円  
「二酸化炭素活性化機構の学理に基づくメタノール室温合成触媒の創成」
9. 文部科学省、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発、小野倫也、分担、2016 年度、0 円、「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」
10. 日本学術振興会、基盤研究(B)、小野倫也、代表、2016 年、3300 千円、「大規模第一原理スピン輸送シミュレーターの開発と革新的デバイス用界面構造の設計」
11. 日本学術振興会科学研究費、若手研究(B)、前島展也、代表、2016 年度、650 千円、  
「多自由度強相関電子系における光誘起超高速ダイナミクスの生成と制御」

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. T. Nakatsukasa, K. Matsuyanagi, M. Matsuo, K. Yabana, "Time-dependent density-functional description of nuclear dynamics ",Reviews of Modern Physics 88, 045004 (2016) .
2. 廣川祐太、朴泰祐、佐藤駿丞、矢花一浩、"電子動力学シミュレーションのステンシル計算最適化とメニーコアプロセッサへの実装"、情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS) Vol.9、No.4、pp.1-14 (2016).
3. M. Lucchini, S.A. Sato, A. Ludwig, J. Herrmann, M.Volkov, L.Kasmi, Y. Shinohara, K. Yabana, L. Gallmann, U. Keller, "Attosecond dynamical Franz-Keldysh effect in polycrystalline diamond", Science **353**, 916-919 (2016).
4. A. Sommer, E.M. Bothschafter, S.A. Sato ,C. Jakubeit, T. Latka, O. Razskazovskaya, H. Fattahi, M. Jobst, W. Schweinberger, V. Shirvanyan,



- V.S.Yakovlev, R.Kienberger, K. Yabana, N. Karpowicz, M. Schultze, F. Krausz, "Attosecond nonlinear polarization and light-matter energy transfer in solids", *Nature* **534**, 86-90 (2016).
5. S. Tsukamoto, T. Ono, K. Hirose, S. Blügel, "Self-energy matrices for electron transport calculations within the real-space finite-difference formalism", *Phys. Rev. E* **95**, 033309 (2017).
  6. S. Iwase, C. J. Kirkham, T. Ono, "Intrinsic origin of electron scattering at the 4H-SiC(0001)/SiO<sub>2</sub> interface", *Phys. Rev. B* **95**, 041302 (2017).
  7. T. Ono, C. J. Kirkham, S. Iwase, "First-Principles Study on Electron Conduction at 4H-SiC(0001)/SiO<sub>2</sub> Interface", *ECS Transactions* **75**, 121 (2016).
  8. C. J. Kirkham, T. Ono, "Importance of SiC Stacking to Interlayer States at the SiC/SiO<sub>2</sub> Interface", *Materials Science Forum* **858**, 457 (2016).
  9. F. P. Sturm, X. M. Tong, A. Palacios, T. W. Wright, I. Zalyubovskaya, D. Ray, N. Shivaram, F. Martin, A. Belkacem, P. Ranitovic, and Th. Weber, "Mapping and Controlling Ultrafast Dynamics of Highly Excited H<sub>2</sub> Molecules by VUV-IR Pump-Probe Schemes", *Phys. Rev. A* **95**, 012501:1-7 (2017).
  10. J. E. Calvert, Han Xu, A. J. Palmer, R. D. Glover, D. E. Laban, X. M. Tong, A. S. Kheifets, K. Bartschat, I. V. Litvinyuk, D. Kielpinski, and R. T. Sang, "The interaction of excited atoms and few-cycle laser pulses", *Scientific Reports* **6**, 34101 (2016).
  11. W. C. Wallace, O. Ghafur, Satya Sainadh U, J. E. Calvert, C. Khurmi, D. E. Laban, M. G. Pullen, K. Bartschat, A. N. Grum-Grzhimailo, D. Wells, H. M. Quiney, X. M. Tong, I. V. Litvinyuk, R. T. Sang, and D. Kielpinski, "Precise and Accurate Measurements of Strong-Field Photoionization and a Transferable Laser Intensity Calibration Standard", *Phys. Rev. Lett.* **117**, 053001:1-5 (2016).
  12. H. Xu, H.T. Hu, X. M. Tong, P. Liu, R. X. Li, R. T. Sang, and I. V. Litvinyuk, "Coherent control of the dissociation probability of H<sub>2</sub><sup>+</sup> in  $\omega$ -3 $\omega$  two-color fields", *Phys. Rev. A* **93**, 063416:1-5 (2016).
  13. C. A. Mancuso, D. D. Hickstein, K. M. Dorney, J. L. Ellis, E. Hasovic, R. Knut, P. Grychtol, C. Gentry, M. Gopalakrishnan, D. Zusin, F. J. Dollar, X. M. Tong, D. Milosevic, W. Becker, H. C. Kapteyn, M. M. Murnane, "Controlling electron-ion rescattering in two-color circularly polarized femtosecond laser fields", *Phys. Rev. A* **93**, 053406:1-13 (2016).

14. Yuya Nemoto, Fumitaka Ohno, Nobuya Maeshima, and Ken-ichi Hino, "Manifestation of anomalous Floquet states with longevity in dynamic fractional Stark ladder with high AC electric fields", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 83, 339, (2016).
15. Yohei Watanabe, Ken-ichi Hino, Muneaki Hase, and Nobuya Maeshima, "Polaronic quasiparticle picture for generation dynamics of coherent phonons in semiconductors: Transient and nonlinear Fano resonance", *Phys. Rev. B* 95, 014301 (2017).

#### B) 査読無し論文

1. S.A. Sato, K. Yabana, "First-principles calculations for initial electronic excitation in dielectrics induced by intense femtosecond laser pulses", *Proc. SPIE10014, Laser-induced Damage in Optical Materials 2016*, 100141A.
2. 矢花一浩、"第一原理計算によるフェムト秒レーザ加工初期過程の解明"、第 85 回レーザ加工学会講演論文集、pp.126-129 (2016).
3. 廣川祐太、朴泰祐、佐藤駿丞、矢花一浩、"電子動力学シミュレーションのステンスル計算に対するメニーコアプロセッサ向け最適化"、2016 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2016) 論文集、2016.
4. K. Yabana, "First-principles simulation for strong and ultra-short laser pulse propagation in dielectrics,Proc", *SPIE9835, Ultrafast Bandgap Photonics*, 983504

#### (2) 国際会議発表

##### A) 招待講演

1. K. Yabana, "Maxwell + TDDFT Multiscale Simulation for Attosecond Spectroscopy", 10th International Conference on Computational Physics, Cotai District, Macao, China, Jan. 16-20, 2017.
2. K. Yabana, "Maxwell + TDDFT multiscale description for interactions of intense pulsed light with dielectrics", 7th Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications, Benasque, Spain, Sept. 11-23, 2016.
3. K. Yabana, "Time-dependent density functional theory for interactions of intense pulsed light with dielectrics", KAIST Frontiers in DFT & Beyond Workshop, KAIST, Daejeon, Korea, Aug. 16, 2016.
4. K. Yabana, "First-principles simulation for strong and ultra-short laser pulse propagation in dielectrics ", *SPIE Defence+Security, Ultrafast Bandgap Photonics workshop*, Baltimore, USA, April 17-21, 2016.

5. T. Ono, "Density functional theory study on transport property of nanomaterials", 5th International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems (IC4N), June 26-30, 2016, Porto Heli, Greece.
6. T. Ono, C. J. Kirkham, S. Iwase, "First-Principles Study on Electron Conduction at 4H-SiC(0001)/SiO<sub>2</sub> Interface", Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid-State Science 2016, October 2-7, 2016, Honolulu, USA.
7. H. Koizumi, "Emergent singularities of wave functions and appearance of persistent motion in dynamical Jahn-Teller problems and superconductivity", XXIII international symposium on the Jahn-Teller effect, Aug. 27-Sep. 1, Tartu, Estonia.
8. H. Koizumi, "Origin of the U(1) field mass in superconductors", New trends of development fundamental and applications: problems, achievements and prospects, Nov. 11, Tashkent, Uzbekistan

B) 一般講演

1. T. Ono, C. J. Kirkham, S. Iwase, "First-principles study on carrier scattering property at 4H-SiC(0001)/SiO<sub>2</sub>", 2016 International Conference on Solid State Devices and Materials, September 26-29, 2016, Tsukuba, Japan.
2. T. Ono, C. J. Kirkham, "First-principles study on atomic and electronic structures of 4H-SiC(0001)/SiO<sub>2</sub> interface", APS March Meeting 2017, March 13-17, 2017, New Orleans, USA.
3. H. Koizumi, "Persistent current from spin-twisting itinerant motion of electrons", 1st international workshop SUPERHYDRIDES: Toward room temperature superconductivity, hydrides and more, May 9-10, Rome, Italy.
4. H. Koizumi, "Possible explanation of the superconducting phase transition as a topological phase transition", Leiden String Seminar, June 14, Leiden, the Netherlands.
5. X. M. Tong and N. Toshima, "Strong Field Ionization of N<sub>2</sub> Molecules in Two-Color Circularly Polarized Laser Field", 12<sup>th</sup> European Conference on Atoms Molecules and Photons, Sept. 5~9, 2016, Frankfurt, Germany
6. Yohei Watanabe, Ken-ichi Hino, Muneaki Hase, Nobuya Maeshima, "Quantum generation dynamics of coherent phonons: Analysis of transient Fano resonance", ICPS2016, July 31 - Augst 5, 2016, Beijing, China.
7. Yohei Watanabe, Ken-ichi Hino, Muneaki Hase, Nobuya Maeshima, "Quantum Generation Dynamics of Coherent Phonon in Semiconductors: Analysis of Pulse

Laser Dependence", APS March Meeting 2017, March 13–17, 2017; New Orleans, Louisiana, USA.

**(3) 国内学会・研究会発表**

**A) 招待講演**

1. 矢花一浩、"パルス光と物質の相互作用に対する第一原理計算：プログラム開発と応用"、第3回材料系ワークショップ～計算物質科学を拓く第一原理計算とその機能モジュール～、秋葉原 UDX、2017 年 2 月 23 日。
2. 矢花一浩、"極限的パルス光と物質の相互作用を記述するマルチスケール第一原理計算"、第3回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会、東京、2016 年 10 月 21 日。
3. 矢花一浩、"第一原理計算によるフェムト秒レーザ加工初期過程の解明"、第 85 回レーザ加工学会講演会、大阪大学吹田キャンパス、2016 年 6 月 9-10 日。

**B) その他の発表**

1. 矢花一浩、"JST-CREST 研究課題の目標と計画"、JST-CREST 研究課題キックオフ+ポスト「京」サブ課題進捗報告合同ミーティング「光・電子融合系の第一原理計算」、三宮、2017 年 1 月 4-5 日。
2. K. Yabana, "TDDFT in solids for electron dynamics induced by ultrashort laser pulses", Seminar at Max-Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter, Hamburg, Germany, November 4, 2016.
3. 植本光治、佐藤駿丞、矢花一浩、"Maxwell+TDDFT マルチスケール第一原理計算による二次元光伝播シミュレーションの試み"、日本物理学会第 72 回年次大会、大阪大学豊中キャンパス、2017 年 3 月 17-20 日。
4. 高木謙介、小野倫也、岩瀬滋、"第一原理計算計による  $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2/\text{Si}$  界面における酸素空孔欠陥に起因したリーク電流の評価"、日本物理学会 2016 年秋季大会、2016 年 9 月 13 日～17 日、金沢大学。
5. 岩瀬滋、小野倫也、"波動関数接合法による第一原理輸送特性計算手法の開発"、日本物理学会 2016 年秋季大会、2016 年 9 月 13 日～17 日、金沢大学。
6. 岩瀬滋、小野倫也、"第一原理計算による熱酸化  $\text{SiO}_2/\text{SiC}$  界面の界面原子構造、電子状態、電子輸送特性の解析"、日本物理学会第 72 回年次大会、2017 年 3 月 17 日～20 日、大阪大学。
7. 高木謙介、小野 倫也、"第一原理計算による  $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2/\text{Si}$  界面における酸素空孔欠陥に起因したリーク電流の評価"、第 64 回応用物理学会春季学術講演会、2017 年 3 月 14 日～17 日、パシフィコ横浜。

8. 小泉裕康、"銅酸化物超伝導体における  $U(1)$  ゲージ場の質量の起源"、日本物理学会第 72 回年次大会、大阪大学豊中キャンパス、2017 年 3 月 17 日～20 日。
9. 渡辺陽平、日野健一、長谷宗明、前島展也、"コヒーレントフォノン生成量子ダイナミクスにおけるパルスレーザー依存性"、2016 年秋季大会（金沢大）2016 年 9 月 13 日・16 日。
10. 横井浩太、前島展也、日野健一、"1 次元拡張イオン性ハバード模型の低エネルギー領域における光励起状態 II"、2016 年秋季大会（金沢大）2016 年 9 月 13 日・16 日。

#### (4) 著書、解説記事等

1. 矢花一浩、佐藤駿丞、篠原康、乙部智仁、"高強度超短パルスレーザーと誘電体の相互作用を記述する第一原理計算"、固体物理 Vol.52 No.3 pp.139-148 (2017)。
2. 矢花一浩、"第一原理計算によるレーザー加工初期過程解明"、レーザー研究 Vol.44 No.12 pp.789-793 (2016)。
3. Y. Egami, S. Tsukamoto, T. Ono, "First-principles calculation method and its applications for two-dimensional materials", Quantum Matter 6, 4 (2017)。
4. T. Ono, S. Saito, S. Iwase, "First-principles study on oxidation of Ge and its interface electronic structures", Jpn. J. Appl. Phys. 55, 08PA01 (2016)。

### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

#### 【異分野間連携】

高性能計算システム研究部門との共同研究

矢花は、高性能計算システム研究部門の朴と、電子ダイナミクスの第一原理計算プログラム ARTED の開発において共同研究を行なっている。小野は、高性能計算システム研究部門の櫻井と、第一原理電子状態・電気伝導特性計算コード RSPACE の高速アルゴリズム開発に関して共同研究を行っている。

#### 【国際連携】

1. ドイツマックスプランク量子光学研究所のアト秒科学実験グループと、高強度パルスレーザーと固体の相互作用に関する共同研究（矢花）
2. スイスチューリッヒ工科大学のアト秒科学実験グループと、高強度パルスレーザーと固体の相互作用に関する共同研究（矢花）
3. オーストリアウィーン工科大学の理論グループと、電子ダイナミクスの計算科学的研究に関する共同研究（矢花）
4. 第一原理計算コード国際共同開発  
小野は、ドイツ・チューリッヒ研究センター及び北海道大学応用物理の物性理論グループと第一原理計算コードの開発に関して共同研究を行っている。
5. 強レーザー場における原子分子過程に関する国際共同研究

全は強レーザー場における原子分子動的過程に関し、アメリカのコロラド大学の実験グループ（Murnane and Kapteyn 教授）と国際共同研究を推進している。

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

小野は、2016 年 9 月大阪大学にて開催された CMD ワークショップのアドバンストコースで、本グループで開発している第一原理計算コード RSPACE のチュートリアルを行った。2017 年 3 月に大阪大学にて開催された CMD ワークショップのスパコンコースで、本グループで開発している第一原理計算コード RSPACE のチュートリアルを行った。

## 9. 管理・運営

1. 矢花は計算科学研究センター 量子物性研究部門主任、運営委員会委員、人事委員会委員、運営協議会委員、共同研究主幹、先端計算科学推進室長数理物質系物理学域 運営委員会委員を務めた。
2. 小泉は 全学計算機システム運営委員会 3D サテライトを担当した。
3. 全は中国事務所の運営委員、留学後援会の理事を担当した。
4. 前島は計算科学研究センター共同利用委員会の一般利用委員会において、当センター大規模一般利用プログラムの申請受付などの業務を担当した。

## 10. 社会貢献・国際貢献

1. 矢花は、京都大学基礎物理学研究所運営協議会委員、テニユアトラック普及・定着事業委員会委員、核理論委員会委員、高エネルギー加速器研究機構大型シミュレーション研究推進委員会委員を務めた。
2. 小野は、ポスト「京」プロジェクト重点課題 7 「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」の産学官連携担当として、ワークショップを開催した。

## 11. その他

小泉は、サバティカルを以下のように取った。

滞在場所	ライデン大学 ローレンツ理論物理学研究所（オランダ、ライデン）
期間	4 月 21-10 月 21 日（現地時間）

## V. 生命科学研究部門

### V-1. 生命機能情報分野

#### 1. メンバー

教授	重田 育照
助教	庄司 光男
助教	栢沼 愛
研究員	原田 隆平（日本学術振興会特別研究員）
研究員	佐藤 竜馬
研究員	鬼頭（西岡） 宏任
研究員	Bui Thi Kieu My
学生	大学院生 3 名（内 1 名は早期修了プログラム社会人博士）、学類生 3 名

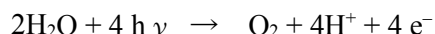
#### 2. 概要

生命機能情報分野では、生体内で重要な働きをしている蛋白質と核酸に注目し、その原子レベルでの特異的機能を理論的に解明することを目的としている。平成 28 年度では、光合成酸素発生中心(PSII-OEC)の反応機構の解明、宇宙空間におけるヒダントイン及びアミノ酸生成機構の解明、分子動力学シミュレーションによる細菌の細胞分裂タンパク質の動的秩序解析、三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョンの理論的研究、紫外線損傷 DNA におけるフリッピング機構の理論的研究、GaN 表面におけるアンモニア吸着反応の第一原理解析について研究が大きく進展した。これらの研究では、センターのスーパーコンピュータ(HA-PACS, COMA)を利用している。センター内の共同研究として宇宙理論分野と高性能計算分野と連携し、それぞれアミノ酸合成反応に関する理論研究とフラグメント分子軌道法プログラム OpenFMO への DFT 法の実装とその検証を行った。

#### 3. 研究成果

##### 【1】 光化学系 II 酸素発生中心(OEC)の反応機構についての理論的研究

光合成は光エネルギーを化学エネルギーに効率的に変換するシステムであり、生命が作り上げた洗練された化学反応系とも言える。光合成反応は巨大な蛋白質複合体内で行われ、一連の化学反応：光捕集、電子伝達、ATP 生成と糖生成が行われる。電子伝達を担う光化学系 II では水を分解し、酸素分子を発生する以下の反応を触媒している。



この反応では化学的に安定な水から電子を引き抜いて(酸化して)いる事から分かるように、極めて難しいため、多くの反応制御がなされていると考えられる。そのため、これらの反応

機構を明らかにする事は、生化学的重要性のみならず人工光合成の有益な設計指針を与えるものと期待される。

今年度は最も初めの化学反応過程である  $S_2 \rightarrow S_3$  遷移について量子古典混合(QM/MM)法を用いて理論解析を進めた。本過程は水分子の挿入の有無で反応過程が大きく変わる。また、 $S_3$  構造は研究開始当初は不明であったため(2017年3月に沈先生らにより報告されるのだが)、両可能性について理論的に検討した。まず、水が挿入されない場合では可能なスピン状態解析を行い、 $S_3$  状態後の OO 結合形成時での反応性の検討を行った。水分子の挿入がある場合については、 $S_3$  状態で OO 結合形成を行う場合と、 $S_4$  状態になってから OO 結合を形成する場合についてそれぞれの機構を検討した。 $S_3$  状態でとりうる可能な中間体の構造と相対安定性について網羅的に理論解析を行った。 $S_2 \rightarrow S_3$  に続く  $S_3 \rightarrow S_4$  反応に関しても既に理論研究を進展させており、様々な OO 結合形成経路(プロトン移動経路、プロトン化状態、OO 結合形成機構)について理論検討を行った。酸素放出経路についても理論計算を完了しており、現在論文投稿中である。酸素発生機構は多くの仮定の上に組み立てられており、まだ多くの検討すべき状況が残されている。そのため、結晶構造、EXAFS、分光実験結果と整合性を吟味しながら、全ての可能性を検討していく事が重要である。例えば酸素結合過程に関してはラジカルカップリング機構とは異なり、非断熱電子移動によって OO 結合が形成される可能性について指摘した。

また、活性中心のコンフォメーション自由度を取り込んだ、自由エネルギーでの議論を行えるように、計算プログラムを整備している。それにより、これまでの膨大な実験結果とより対応させることが可能となり、PSII の酸素発生機構が急速に明確になると期待される。

## 【2】 宇宙空間におけるヒダントイン及びアミノ酸生成機構の解明

宇宙空間におけるアミノ酸の生成機構に関しては、様々な反応経路が提唱されているが、本研究では、Bücherer-Bergs 反応によりアミノアセトニトリルからヒダントインが生成され、ヒダントインが加水分解されることで、最も単純な構造を持つアミノ酸であるグリシンが生成される経路(図 1)を、量子化学計算を用いて解析した。アミノアセトニトリルは星間雲で観測されており、また、ヒダントインも隕石から検出されているなど、どちらも宇宙化学において重要な分子である。

密度汎関数法(DFT、Density Functional Theory)を用い、汎関数は B3LYP、基底関数は 6-31G\* として計算を行った。星間ダスト上の氷表面の影響を検証する為、触媒として働く水分子がない場合と 1 個、さらに 2 個存在する場合について、反応障壁の高さを比較した。

図 2 に、水分子なしの場合と水分子を一つ考慮した場合の反応エネルギープロファイルを示した。今回検証した反応経路における 9 つの遷移状態の中で、最も反応障壁が高い反応は、



触媒となる水分子なし及び一個を考慮した場合で、それぞれ  $71.5 \text{ kcal mol}^{-1}$  及び  $56.1 \text{ kcal mol}^{-1}$  となり、水分子を考慮することで、 $15 \text{ kcal mol}^{-1}$  反応障壁が減少した。さらに、触媒となる水分子を 2 個に増やした場合では、障壁は  $46.9 \text{ kcal mol}^{-1}$  にまで減少した。このことから、本反応において、触媒となる水分子の重要性、即ち、星間ダスト上の氷表面の重要性が示された。しかし、反応障壁は依然として高いことから、更なる解析を進めている。

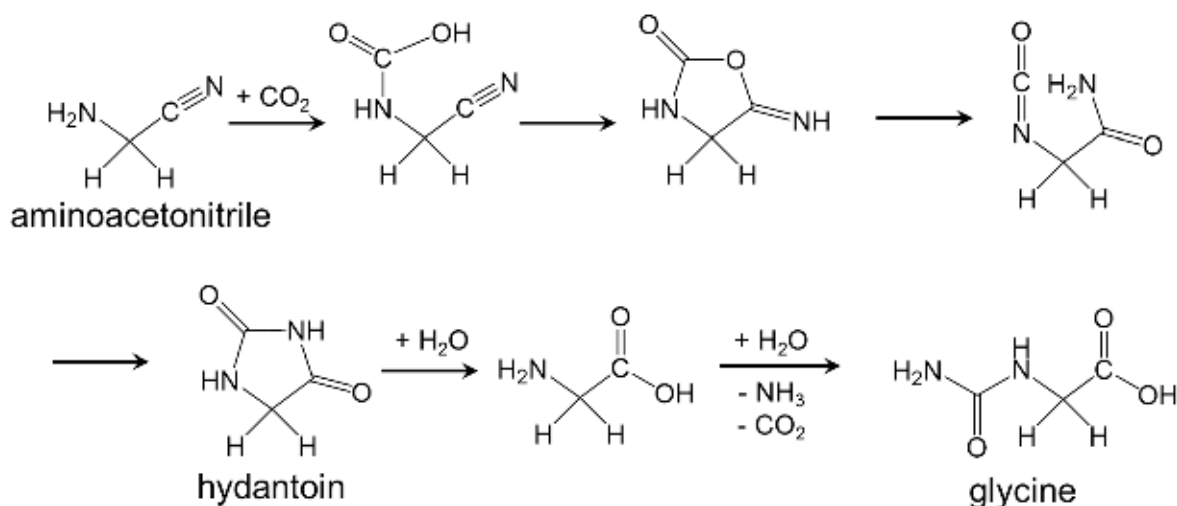


図 1 ヒダントインを経由するグリシン生成経路

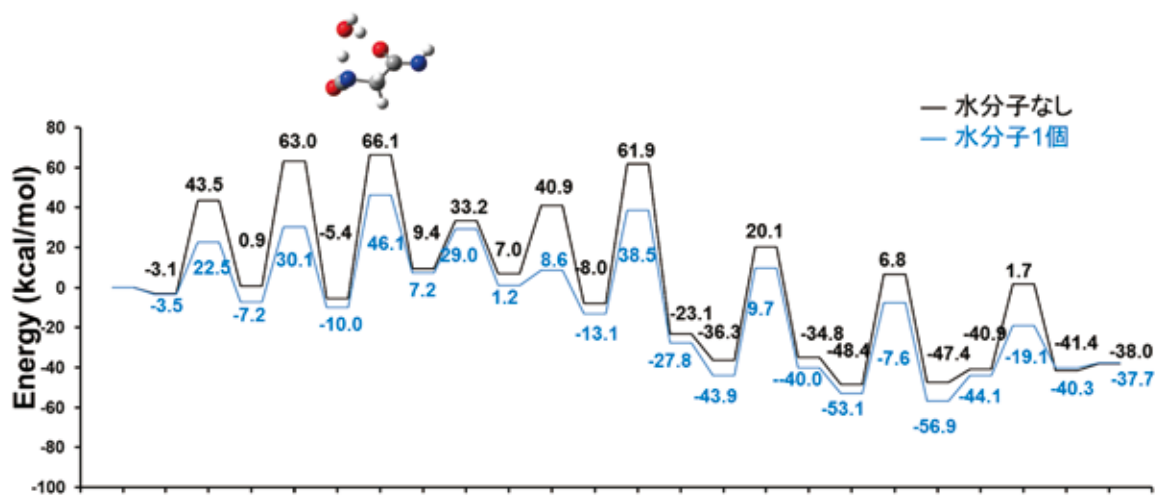


図 2 ヒダントインを経由するグリシン生成経路の反応エネルギープロファイル

### 【3】 分子動力学法による細菌の細胞分裂タンパク質の動的秩序解析

細菌の細胞分裂タンパク質 FtsZ は、図 3 に示す様に細胞膜の内側にリング状のフィラメント (Z リング) を形成し、ダイナミックに離合集散を繰り返すことで細胞膜に陥入を生じさせる。この細胞膜の陥入は Z リングの収縮により起きると考えられるが、その分子メカニズムには未解明な部分が多い。平成 28 年度は、立命館大学・松村教授の研究グループが X 線構

造解析により決定した黄色ブドウ球菌 FtsZ の結晶構造をもとに、全原子の分子動力学シミュレーションを実行し、細菌の細胞分裂タンパク質の動的秩序解析を行った。大変興味深いことに、X 線結晶構造解析から同一結晶中に立体構造が大きく異なる FtsZ が 2 状態 (T-状態と R-状態) 存在していることが分かった。同一種で状態の異なる 2 構造が得られた例はこれまでになく大変貴重な実験結果であるため、T-R 状態間の構造遷移経路の探索を行い細胞分裂タンパク質の動的秩序過程の解析を行った。一般的に、生体機能に関係する大規模な構造遷移を分子動力学シミュレーションにより再現するためには、極めて長時間のシミュレーション時間が必要になる。この問題に対して、出来るだけ短時間かつ効率的に重要な構造変化を再現するためには、何らかの構造サンプリング手法を適用する必要がある。本研究では、研究室で開発しているタンパク質の構造サンプリング法の中から、レアイベントを効率的に計算機上に再現することが出来るカスケード型超並列シミュレーション (PaCS-MD) を適用し、同一結晶中の 2 状態構造間の構造遷移経路を探索した。

PaCS-MD は、反応過程における始構造と終構造が既知である条件の下で、始構造から終構造へ至る構造遷移経路を探索出来る。具体的には、反応座標として終構造から測定した平均自乗距離 (RMSD) の値を参照しながら類似した分子構造を遷移確率が高い初期構造として選択し、短時間 MD をリスタートさせるサイクルを繰り返す。これにより、生成物へ遷移する「稀にしか起こらない構造揺らぎ」の出現確率を上昇させることができる。結果的に、遷移確率の高い分子構造から経路探索を逐次的に再開することで探索領域が終構造へ徐々に近づいていき、効率的に遷移経路を探索することができる。定量的には、生成物から測定した RMSD 生成物の値が徐々に小さくなっていき、閾値より小さくなったら、遷移完了とする。

PaCS-MD により得られた遷移経路を解析したところ、状態遷移における重要なアミノ酸残基のメカニズムを突き止めることができた。具体的には、29 番目のアルギニン残基に注目したところ、側鎖のフリップがスイッチとなり状態遷移を制御していることが明らかになった。図 3 に示す様に、Arg29 の側鎖がフリップすることで Asn188 の側鎖と水素結合を形成し、FtsZ 中央に存在しているヘリックスが振れた構造から振れが解消された直線的な形状に構造遷移するメカニズムを解明した。また、PaCS-MD により抽出した Arg29-Asn188 の水素結合距離の時系列データから (図 3・右下)、T-R 状態遷移に伴い Arg29-Asn188 間に水素結合が形成されていることが分かる。更に、FtsZ モノマーは 2 構造間の構造遷移において基質である GDP を段階的に認識・解除していることを解明し、中間体構造を経て多段階に状態遷移していることも突き止めた。本研究において実験と計算化学が密に連携することで、FtsZ モノマーの構造揺らぎと T-R 状態間構造遷移を解明し、FtsZ ポリマーの離合集散の関係を解明するための足がかりを築くことが出来た。本年度は FtsZ モノマーのシミュレーションのみ実行したが、次年度は FtsZ ポリマーのシミュレーションも検討し、より生体環境に近いモデルを構築して細胞分裂過程の動的秩序解明を進めて行く予定である。

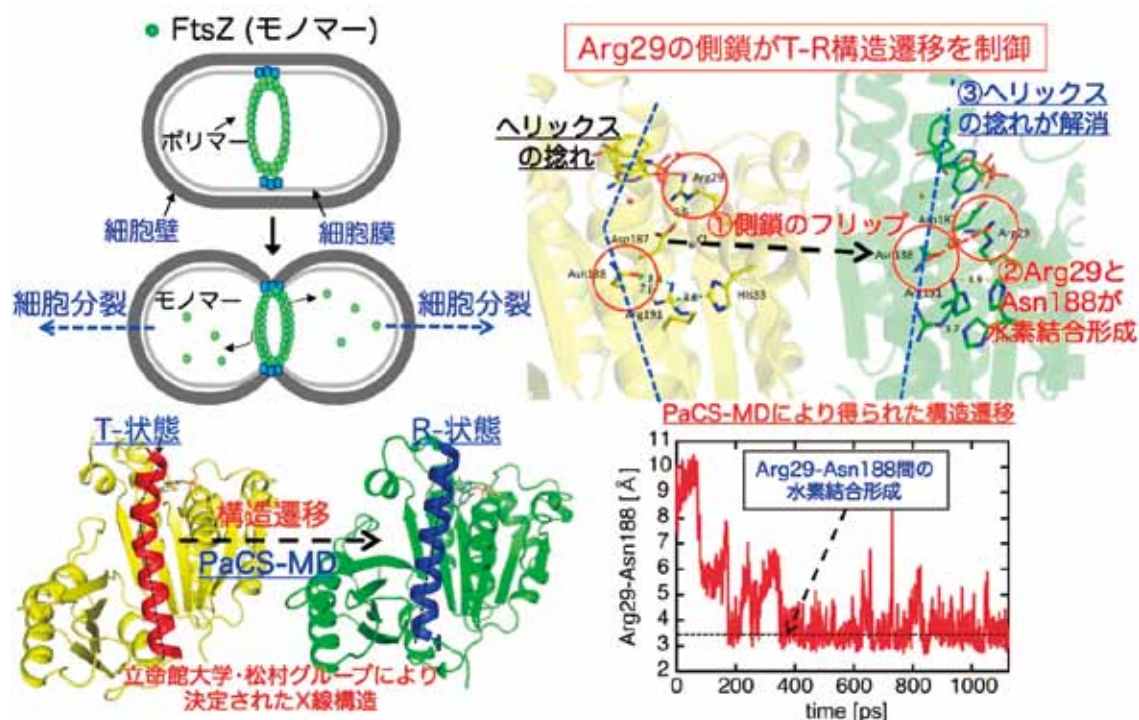


図 3: 黄色ブドウ球菌由来の FtsZ モノマーの状態遷移メカニズム

#### 【4】 三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョンの理論的研究

低いエネルギー（長波長）の光から高いエネルギー（短波長）の光へと変換する機構としてフォトン・アップコンバージョン（UC）が知られている。近年、これまで利用が不可能であった太陽光の可視・近赤外領域を利用して UC を起こす機構として三重項-三重項消光（TTA）が注目されている。TTA-UC の研究は盛んに行われており、増感剤として白金またはパラジウムオクタポリフィリン（Pt OEP または PbOEP）、発光体として 9,10-ジフェニルアントラセン（DPA）またはその誘導体の組み合わせがよく用いられている。この組み合わせは溶液内で太陽光レベルの光を照射することで TTA-UC を観測している。しかし、このシステムは酸素分子が豊富に存在している環境では TTA-UC が起こらないという問題点がある。また、溶液系では分子の拡散と衝突が反応律速であるため粘度の低い揮発性の有機溶媒を用いる必要があることも問題である。そのため、実用化するためには空気中でも安定して TTA-UC が起こる分子システムの提案・開発が必要である。現在、結晶系、無溶媒系、金属有機構造体などによって空気中での TTA-UC が観測されている。しかし、多くは反応効率が低く実用化には至らない。

本研究では、TTA-UC の反応機構を分子レベルで解明することで、空気中においても実用化に耐えうる反応効率を実現するために必要な因子を特定することを目的とし研究を実施した。TTA-UC が電子交換機構によって生じることから DPA の二量体モデルに対して電子移動

速度 ( $k_{ET}$ ) を算出し、分子配向および距離との依存性を評価した。分子配向による依存性については、距離が近い領域では角度が小さい (0 度~30 度) ときのほうが、角度が大きいときよりも速い電子移動速度であったが ( $10^{-3}$  ps <  $10^0$  ps)、距離が離れるにつれ角度が大きいときの方が電子移動速度が速くなることがわかった。距離の依存性については 9.5 Å 近傍を境に 0 度と 90 度の電子移動速度の大小が逆転していることがわかった。これらのことから、短距離では角度が小さいとき、長距離では角度が大きいときに TTA が起こりやすいことがわかった。さらに分子の拡散係数を見積もった結果、 $D=1.77 \times 10^{-10}$  m<sup>2</sup> s<sup>-1</sup> であった。そして、並進拡散は 37 μs と遅く、DPA の回転拡散においてはプロパノール内においておよそ 100 ps と測定されている。このことから、TTA が起こる際に、必ずしも近距離になる必要はなく、分子が衝突する間に分子の回転が速い時間スケールで起こり、距離が離れていたとしても TTA が起こりえる分子配向になり TTA が起こることが示唆できる。さらに分子動力学 (MD) 計算から DPA 間の距離を解析した結果、500 ns の間に 10 Å 以内になる確率は 10% 程度であったことから近距離での反応は起きにくく、長距離で TTA が起こっていることがわかった。本研究成果は Chemistry Letters に掲載された。

#### 【5】 紫外線損傷 DNA におけるフリッピング機構の理論的研究

DNA は紫外線によって損傷を受けることが知られている。そして、受けた損傷が修復されないと DNA の転写や複製の阻害、植物の静緒阻害などの原因となる。生物はこの損傷を修復する機能を有する光回復酵素 (PHR) という酵素を保有している。PHR は紫外線損傷 DNA を認識して結合し、光誘起電子移動反応によって修復する。紫外線損傷 DNA において PHR と結合するために、損傷部位が二重らせん構造から外れるフリッピングと呼ばれる現象が起こることが X 線結晶構造解析により明らかになった。しかし、フリッピングがどの段階で生じているかについては明らかではない。

本研究では、フリッピングが DNA が損傷した際に起こっているのか蛋白質との相互作用によって起こっているのかを明らかにするために MD 計算と量子化学計算を用いて、その反応機構を調べた。MD 計算の結果、DNA 単体ではフリッピングは生じなかった。さらに、損傷部位と核酸間の相互作用エネルギーを量子化学計算によって見積もった結果、損傷部位と隣接する核酸間の相互作用エネルギーが  $< -10$  kcal mol<sup>-1</sup> であった。以上のことから紫外線損傷部位は隣接する核酸と強く相互作用しており、DNA 単体ではフリッピングは生じず、フリッピングを起こすためには外部からの力が必要であることを明らかにした。本研究成果は、Biophysics and Physicobiology に採択された。

#### 【6】 第一原理計算による GaN 表面におけるアンモニアの吸着と脱着過程の解析



III-V 族に属する窒化ガリウム (GaN) はバンドギャップが広いこと、オプトエレクトロニクス、フォトンクス、高出力および高温動作デバイスに応用が期待されており、近年、非常に注目を集めている。薄膜の結晶品質を改善し、その成長プロセスを最適化するためには、異なる前駆体の表面吸着および堆積メカニズムの解明が必須である。我々は、実空間密度汎関数理論 (RSDFT) [Iwata, J., et al, J. Comput. Phys. 229, 2339 (2010)] を用いて、前駆体として  $\text{NH}_3$  が吸着した際の GaN の(0001)面での結晶成長過程を研究した。まず計算の妥当性を検証するため、格子パラメータを計算したところ( $a = 3.2 \text{ \AA}$ ,  $c = 5.2 \text{ \AA}$ )、実験値を上手く再現することができた[Schulz, H. et al, Solid State Commun. 23, 815 (1977)]。得られた構造を元に、 $2 \times 2$  の表面構造をモデル化し、既往研究と良い一致をすることを確認した[Chugh, M. et al, J. Phys. Chem. C, 120, 8076 (2016)]。Ga アドアトム表面構造は HCP サイトで一番安定であり、一方、N アドアトム表面構造は FCC サイトで最も安定であった(図 4 参照)。 $\text{NH}_3$ 、 $\text{NH}_2$ 、 $\text{NH}$  に関して、清浄表面、および、Ga アドアトム表面への吸着について検討した。清浄表面へは、 $\text{NH}_3$  はオントップサイト、 $\text{NH}_2$  はブリッジサイト、 $\text{NH}$  は FCC サイトへそれぞれ吸着するのが、最も安定であることを明らかにした。一方、Ga アドアトム表面上では、 $\text{NH}_3$ 、 $\text{NH}_2$ 、 $\text{NH}$  すべての前駆体は、オントップサイトが最も安定であることが分かった。

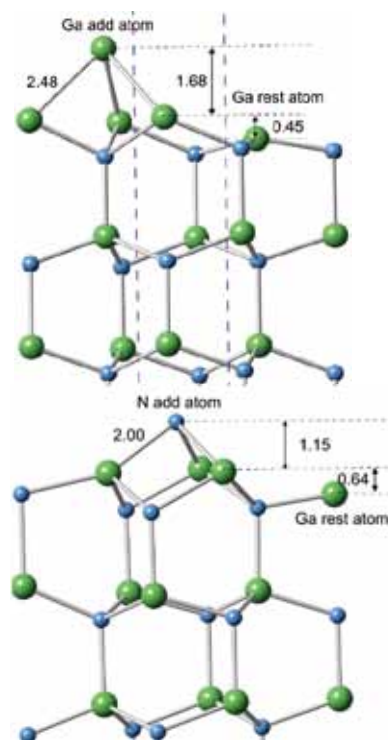


図 4: (a) Ga-HCP、および、  
(b) N-FCC アドアトム構造  
( $\text{\AA}$  単位)

## 【7】 フラグメント分子軌道法プログラム OpenFMO への DFT 実装と性能評価

蛋白質などの巨大分子の電子状態計算を解く代表的な手法として、フラグメント分子軌道 (FMO) 法がある。FMO 法は、大きな分子系をフラグメントに分割し、各フラグメントに対して解かれた電子状態から全系のエネルギーを決定することで、計算コストの問題を回避する。OpenFMO は、稲富らによって開発された Hartree-Fock (HF) レベルの FMO (FMO-HF) 計算を行うプログラムで、MPI+OpenMP ハイブリッド並列で動作する。我々は、これまで、OpenFMO の FMO-HF 計算ホットスポットを CUDA で実装し、GPGPU クラスタを用いて高速な FMO 計算を実行することに成功してきた。一方、現在の固体や分子の電子状態計算では、HF 法よりも精度の高い密度汎関数理論(DFT)を用いることが一般的になっている。そこで、この研究では、DFT レベルの FMO(FMO-DFT)計算が行えるように、DFT コードを OpenFMO に MPI+OpenMP ハイブリッド並列で実装し、その性能評価を行った。

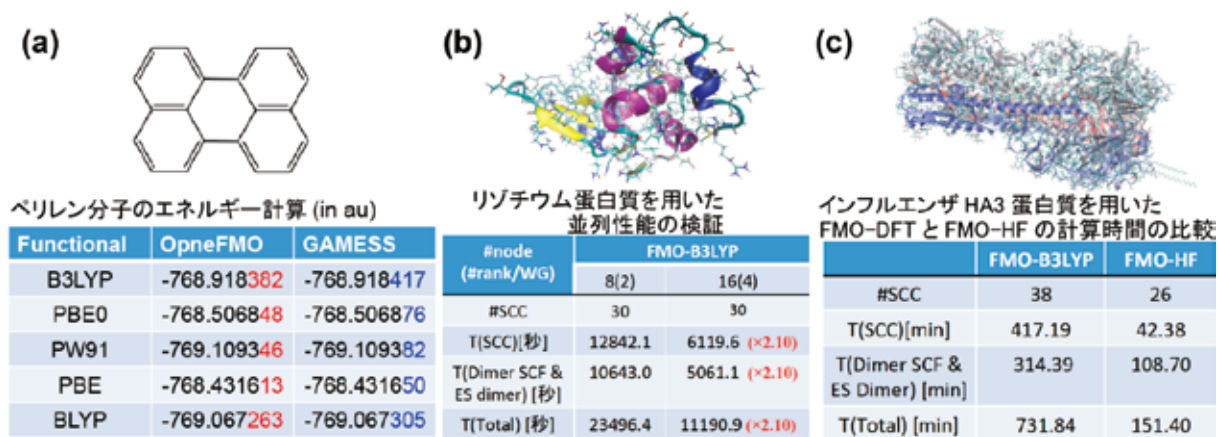


図 5 (a) ペリレン分子(b)リゾチウム蛋白質(c)インフルエンザ HA3 蛋白質、に対する DFT 版 OpenFMO プログラムのベンチマーク計算(基底関数は 6-31G(d)を使用)

DFT コードの交換相関汎関数ポテンシャルは、実際の分子計算で一般的に用いられる、一般勾配法汎関数 BLYP、PW91、PBE と、混合汎関数 B3LYP、PBE0 を実装した。まず、各フラグメントの電子状態を解くルーチン(スケルトンプログラム)を用いて、正しく DFT 計算が実行されるかを確認した。図 5 (a) にはペリレン分子を用いた計算例で、DFT 版 OpenFMO スケルトンプログラムが、汎用量子化学計算プログラム GAMESS の電子状態エネルギーを十分に再現していることが分かる。

次に、リゾチウム蛋白質(1,961 原子、57 フラグメント)を用いて、DFT 版 OpenFMO プログラムが正しく MPI+OpenMP で並列動作することを確認した。図 5(b)は、HA-PACS ベースクラスタ上で、1 ノード当たり 4 MPI ランクを 4 OpenMP スレッド環境で FMO-B3LYP / 6-31G(d) 計算を実行した例である。16 ノード計算が、8 ノード計算に較べて正しくスケール(2 倍の高速化)していることが分かる。

最後に、インフルエンザ HA3 蛋白質(23,460 原子、721 フラグメント、澤田敏彦(産総研)らによって作成)を用いて、DFT 版 OpenFMO プログラムの超並列計算が正しく動作することを確認した。図 5(c)では、HA-PACS ベースクラスタ上で、1 ノード当たり 4MPI ランクを 4 OpenMP スレッド環境で起動し、64 ノード(計 256MPI ランク・GPU256 台)から FMO-HF/6-31G(d)と FMO-B3LYP/6-31G(d)計算を実行した場合の、計算時間を比較している。FMO-DFT 計算は正しく完了するが、FMO-HF 計算と比較すると 5 倍程度遅い。これはまだ、FMO-DFT 計算のホットスポットが CUDA で実装されていないため、FMO-HF 計算のように GPU によって加速されないからである。今後、FMO-DFT 計算のボトルネックである、グリッドを用いて交換相関項の数値計算を行うルーチンを CUDA で実装し、GPU による加速化とその性能検証を行っていく予定である。

#### 4. 教育

##### 【卒業研究発表】

木間塚政人、「分子動力学法を用いた不凍蛋白質-水分子間相互作用解析」

山崎笙太郎、「シアン耐性酸化酵素における反応機構についての理論的研究」

石井優輝、「FtsZ 繊維の構造変化についての分子動力学解析」

##### 【博士修了】

前川真太郎、「光学材料および生体材料評価に関する第一原理計算法の研究」

##### 【講義】

重田育照、計算物理学 2、物理学類専門科目、春 ABC

重田育照、計算物理学 3、物理学類専門科目、秋 ABC

重田育照・庄司光男、生物物理学 I、物理学類専門科目、秋 AB

庄司光男、生物物理科学、物理学類専門科目、春 ABC

#### 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

##### 【受賞】

原田隆平、若手招待講演賞、第 54 回日本生物物理学会、2016 年 11 月 26 日

佐藤皓允、学生発表賞、第 54 回日本生物物理学会、2016 年 11 月 27 日

##### 【外部資金】

##### 【研究代表者】

1. 新学術領域研究「複合光応答」計画研究、重田育照（代表者）（平成 26～30 年度）「実験と理論の協奏的アプローチによる多重スピン励起子変換制御」
2. 基盤研究 C：庄司光男（代表者）（平成 26 年～28 年度）「トレオニン合成酵素の全反応機構の理論的解明」
3. 若手研究（A）：原田隆平（研究代表者）（平成 28 年～30 年度）「G タンパク質共役受容体におけるシグナル伝達機構の解明」

##### 【分担研究者】

1. 挑戦的萌芽研究：重田育照（分担者）（代表者：岡野泰則 大阪大学教授）（平成 27～28 年度）「メゾスケール空間内移動速度論創成のための挑戦的研究」
2. 特別推進研究：庄司光男（分担者）（代表者：沈建仁 岡山大学教授）（平成 24～28 年度）「光合成系 II における水分解反応の学理解明」

【知的財産権】（種別、氏名、課題名、年月日）

1. [国際特許] 特許名: Information Processing Apparatus and Simulation Method, 発明者: Tomotake Nakamura, Ryuhei Harada, Yasuteru Shigeta, 出願日: 2016 年 8 月 4 日, 特許庁: US (米国), 申請番号: 15/228,540
2. [国際特許] 特許名: Information Processing Apparatus and Index Dimension Extracting Method, 発明者: Tomotake Nakamura, Ryuhei Harada, Yasuteru Shigeta, 出願日: 2016 年 8 月 4 日, 特許庁: US(米国), 申請番号: 15/228,873

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

- (1) J. Fujita, R. Harada, Y. Maeda, Y. Saito, E. Mizohata, T. Inoue, Y. Shigeta, H. Matsumura, "Identification of the key interactions in structural transition pathway of FtsZ from *Staphylococcus aureus*", *J. Struct. Biol.* **198**, 65-73 (2017).
- (2) Y. Kitagawa, M. Asaoka, Y. Natori, K. Miyagi, R. Teramoto, T. Matsui, Y. Shigeta, M. Okumura, M. Nakano, "Theoretical study on relationship between spin structure and electron conductivity of one-dimensional tri-nickel (II) complex", *Polyhedron*, in press (2017).
- (3) W. Naito, N. Yasuda, T. Morimoto, Y. Shigeta, H. Takaya, I. Hisaki, H. Maeda, "Doubly N-Methylated Porphyrinoids", *Org. Lett.*, **18**, 3006-3009 (2016).
- (4) S. Maekawa, M. Krzysztow, Y. Shigeta, "Refractive Indices of Organo-Metallic and -Metalloid Compounds: A Long-Range Corrected DFT Study", *J. Comp. Chem.* **37**(32), 2759-2769 (2016).
- (5) S. Negoro, Y. Kawashima, N. Shibata, T. Kobayashi, T. Baba, Y.-H. Lee, K. Kamiya, Y. Shigeta, K. Nagai, I. Takehara, D.-I. Kato, M. Takeo, Y. Higuchi, "Mutations affecting the internal equilibrium of the 6-aminohexanoate-dimer hydrolase reactions", *FEBS Lett.*, **590**(18), 3133-3143 (2016).
- (6) R. Yamakado, S. Sato, Y. Shigeta, H. Maeda, "Ion-Pairing Crystal Polymorphs of Interlocked [2+1]-type Receptor-Anion Complexes", *J. Org. Chem.*, **81**, 8530-8536 (2016).
- (7) S. Maekawa, R. Sato, K. Hirao, Y. Shigeta, "Solvent effects on excited-state electron transfer rate of pyrene-labeled deoxyuridine: A theoretical study", *Chem. Phys. Lett.*, **644**, 25-30(2016).
- (8) M. Shoji, H. Isobe, T. Nakajima, K. Yamaguchi, "Large-scale QM/MM calculations of the CaMn<sub>4</sub>O<sub>5</sub> cluster in the oxygen-evolving complex of photosystem II: comparisons with EXAFS structures", *Chem. Phys. Lett.*, **658**, 354-363 (2016).
- (9) Y. Abe, M. Shoji, Y. Nishiya, H. Aiba, T. Kishimoto, K. Kitaura, "Reaction mechanism of sarcosine oxidase elucidated using FMO and QM/MM methods", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 9811-9822



(2017).

- (10) W. Tanaka, M. Shoji, F. Tomoike, Y. Ujiie, K. Hanaoka, R. Harada, M. Kayanuma, K. Kamiya, T. Ishida, R. Masui, S. Kuramitsu, Y. Shigeta, "Molecular Mechanisms of Substrate Specificities of Uridine-Cytidine Kinase", *Biophys. Physico.*, **13**, 77-84 (2016).
- (11) R. Hadara, Y. Takano, Y. Shigeta, "TaBoo SeArch(TBSA) algorithm with a modified inverse histogram for reproducing biologically relevant rare-events of proteins", *J. Chem. Theoret. Comp.*, **12**, 2436-2445 (2016).
- (12) R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, "A Fast Convergent Simulated Annealing Algorithm for Protein-Folding: Simulated Annealing Outlier FLOODing (SA-OFLOOD) Method", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **89** (11), 1361-1367 (Cover).
- (13) R. Harada, Y. Shigeta, "Efficient Conformational Search Based on the Structural Dissimilarity Sampling: Applications to Reproductions of Structural Transitions in Maltodextrin Binding Protein", *J. Chem. Theoret. Comp.*, **13**(3), 1411-1423(2017).
- (14) R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, "Common Folding Processes of the Fast-Folding Proteins: Partial Formations of Secondary Structures Initiate the Immediate Protein Folding", *J. Comp. Chem.* **38** (Front Cover), 790-797(2017).
- (15) R. Harada, Y. Shigeta, "How does the number of initial structures affect the conformational sampling efficiency and quality in Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (PaCS-MD)?", *Chem. Lett.*, **46**, 862-865 (2017)
- (16) R. Sato, H. Kito-Nishioka, T. Yanai and Y. Shigeta., "Theoretical Analyses on Triplet-triplet Annihilation Process of 9,10-diphenylanthracene in Solution", *Chem. Lett.*, **46** (2017).
- (17) R. Sato, R. Harada and Y. Shigeta., "Theoretical analyses on a flipping mechanism of UV-induced DNA damage", *Biophys. Physico.*, **13**, 311-319 (2016).
- (18) R. Yamakado, R. Sato, Y. Shigeta and H. Maeda, "Ion-Pairing Crystal Polymorphs of Interlocked [2+1]-Type Receptor-Anion Complexes", *J. Org Chem.*, **81**, 8530-8536 (2016).
- (19) R. Yamakado, Y. Ashida. R. Sato, Y. Shigeta, N. Yasuda and H. Maeda, "Cooperatively Interlocked [2+1]-Type  $\pi$ -system-Anion Complexes", *Chem. Eur. J.*, **23**, 4160-4168 (2017).

## B) 査読無し論文

### (2) 国際会議発表

#### A) 招待講演

- (1) Y. Shigeta, "A consistent scheme for accurately estimating acid dissociation constant ( $pK_a$ ) and redox potential"(Invited), *Fourth Changsha International Workshop on Theoretical and*

*Computational Chemistry with Materials 2016*, June 10th-12th, Hunan, China.

- (2) M. Shoji, H. Isobe, K. Yamaguchi, "Reaction mechanisms for the S2 to S3 transition in the oxygen-evolving complex of photosystem II" (**Invited**), *AWEST 2016*, June 19-21, Awaji island, Hyogo, Japan.
- (3) Y. Shigeta, "Simple conformational search methods for understanding biological functions" (**Invited**), Shanghai Workshop on Frontiers in Molecular Biophysics, Jul. 23<sup>th</sup>-26<sup>th</sup> 2016, Shanghai, China.
- (4) Y. Shigeta, "Efficient Conformational Search Methods for Protein Folding Problems" (**Invited**), The 9th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP 2016), Jul. 17<sup>th</sup>-22<sup>nd</sup> 2016, Grand Forks, North Dakota, USA.
- (5) M. Shoji, H. Isobe, J.-R. Shen, K. Yamaguchi, Y. Shigeta, Y. Takano, "Electronic structures of the synthetic model of the photosynthetic oxygen-evolving complex" (poster, **Invited**), *VUVX satellite workshop*, Jul. 1<sup>st</sup> 2016, University of Zurich, Zurich, Switzerland.
- (6) R. Harada, Y. Shigeta, "Developments of Efficient Conformational Sampling Methods for Reproducing Biologically Rare Events" (**Invited**), *The 54<sup>th</sup> Annual Meeting of Biophysical Society of Japan*, Nov. 25<sup>th</sup> 2016, Tsukuba, Japan.

## B) 一般講演

- (1) S. Maekawa, M. Krzysztow, Y. Shigeta, "Refractive Indices of Organo-Metallic and -Metalloid Compounds: A Long-Range Corrected DFT Study" (**Oral**), *Asian Photochemistry Conference*, Dec. 4<sup>th</sup>-8<sup>th</sup> 2016, Singapore.
- (2) Y. Shigeta, K. Kamiya, T. Sugimura, "Intramolecular Stereodynamic Effects on Ketene-Olefin [2 + 2] Cycloadditions of 2,4-Pentanediol Tether" (**Poster**), *Stereodynamics 2016*, Nov. 6<sup>th</sup>-11<sup>th</sup> 2016, Taipei, Taiwan.
- (3) K. Kamada, Y. Kitagawa, R. Kishi, M. Nakano, R. Sato, Y. Shigeta, "Control of multiple spin exciton states by synergetic studies of theory and experiment" (**Oral**), 1st *International Symposium on Photosynergetics*, June 2nd-4th 2016, Osaka, Japan.
- (4) M. Shoji, "A quantum chemical study of the glycine formation reactions in interstellar medium" (**Oral**), *ABC workshop*, Mar. 21-23 2017, Hiroshima, Japan.
- (5) M. Shoji, H. Isobe, K. Yamaguchi, "Large-Scale QM/MM study on the oxygen-evolving complex of photosystem II" (**poster**), *79<sup>th</sup> Harden Conference*, Apr. 16<sup>th</sup>-20<sup>th</sup> 2016, Innsbruck, Austria.
- (6) R. Sato, K. Kamada, R. Kishi, Y. Kitagawa, M. Nakano, Y. Shigeta, "Theoretical Studies on Photon-uoconversion of 9,10-Diphenylantracene Derivatives via Triplet-triplet Annihilation

- Mechanism in Solvent" (**Poster**), *Asian Photochemistry Conference*, Dec. 4<sup>th</sup>-8<sup>th</sup> 2016, Singapore.
- (7) R. Sato, R. Harada, Y. Shigeta, "On the Flipping-out mechanism of the UV-induced DNA damage", (**Poster**), *The 54<sup>th</sup> Annual Meeting of Biophysical Society of Japan*, Nov. 27<sup>th</sup> 2016, Tsukuba, Japan
- (8) R. Sato, K. Kamada, Y. Kitagawa, M. Nakano, Y. Shigeta, "Theoretical Analysis of Triplet-Triplet Annihilation Based Photon Up-Conversion Mechanism in Solvent" (**Poster**), *1st International Symposium on Photosynergetics*, June 2nd-4th 2016, Osaka, Japan.
- (9) K. Kidachi, Y. Komatsu Y, A. Sato, M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Shigeta, Y. Aikawa, M. Umemura, "A theoretical study of glycine formation reactions in interstellar medium" (**poster**), *the 57th Sanibel Symposium*, Feb. 19<sup>th</sup>-24<sup>th</sup> 2017, Georgia, USA.
- (10) B. My, J. Iwata, Y. Shigeta, "First principle analysis of ammonia adsorption and desorption on GaN surface" (**Poster**), *The 57th Sanibel Symposium*, Feb. 19<sup>th</sup>-24<sup>th</sup> 2017, Georgia, USA.
- (11) H. Kitoh-Nishioka and Y. Shigeta, "Singlet Fission Couplings Calculated with Complete-Active-Space Self-Consistent Field (CASSCF) Theory" (**Poster**) *The 57th Sanibel Symposium*, Feb. 19<sup>th</sup>-24<sup>th</sup> 2017, Georgia, USA.
- (12) A. Sato, "Ly alpha Irradiation in the Early Phase Milky Way Galaxy Responsible for Initiating Homochirality" (**Oral**), *Formation of the Solar System and the Origin of Life*, Feb. 20<sup>th</sup>-24<sup>th</sup> 2017, Leiden, Netherland.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

- (1) 庄司光男、「光合成酸素発生中心の電子・スピン状態の理論解析」(招待講演), SEST2016, 2016 年 11 月 11 日、大阪市立大学、大阪.
- (2) 重田育照、「理論計算によるタンパク質の機能解析と制御：最近の進展」、分子研理論・計算領域セミナー、May 19<sup>th</sup> 2016、分子科学研究所、岡崎、愛知.

#### B) その他の発表

- (1) 庄司光男、磯部寛、山口兆、「光化学系 II 酸素発生中心(PSII-OEC)における S<sub>2</sub>->S<sub>3</sub> 状態変化についての理論的研究」(**ポスター**)、第 89 回日本生化学会大会、2016 年 9 月 26 日、東北大学、仙台.
- (2) 庄司光男、「星間ダスト上でのアミノ酸生成機構についての理論的研究」(**口頭**)、宇宙生命計算科学連携拠点第 2 回ワークショップ、2016 年 4 月 27 日~28 日、筑波大学、つくば.

- (3) 栢沼愛、「星間空間におけるアミノ酸生成反応の第一原理計算」、ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第 1 回公開シンポジウム: 惑星の起源・進化と環境変動の解明を目指して、2017 年 3 月 6 日、神戸大学、神戸.
- (4) 原田隆平、重田育照、「カスケード型分子動力学計算によるタンパク質の折りたたみ過程解析」(口頭)、第 43 回生体分子化学討論会、2016 年 5 月 24 日～25 日、名古屋大学、名古屋.
- (5) 原田隆平、鷹野優、重田育照、"Universality of protein folding investigated by a rare-event search method" (ポスター)、第 16 回蛋白質科学会、2016 年 5 月 7 日～9 日、福岡国際会議場、福岡.
- (6) 佐藤竜馬、鎌田賢司、岸 亮平、中野雅由、重田育照、「溶媒中における三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョン機構に関する研究」、第 19 回理論化学討論会、2016 年 5 月 23 日～25 日、早稲田大学、東京.
- (7) 佐藤竜馬、鎌田賢司、岸 亮平、北河康隆、中野雅由、重田育照、「A Theoretical Studies on Up-conversion Mechanism via Triplet-Triplet Annihilation in Solution」、TIA"かけはし"ポスター交流会、2016 年 8 月 30 日.
- (8) 佐藤竜馬、鎌田賢司、岸 亮平、北河康隆、中野雅由、重田育照、「三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョン機構に関する理論的研究」、第 10 回分子科学討論会、2016 年 9 月 13 日～15 日、東京大学、東京.
- (9) 佐藤竜馬、原田隆平、重田育照、「紫外線損傷 DNA における Flipping 機構」、第 54 回日本生物物理学会年会、2016 年 11 月 25 日～27 日、つくば国際会議場、つくば.
- (10) 佐藤竜馬、重田育照、「9,10-ジフェニルアントラセンおよびその誘導体に対する三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョン機構の理論的研究」、高次複合応答分子システムの開拓と学理の構築 第 5 回公開シンポジウム・第 5 回若手セミナー、2017 年 1 月 20 日～21 日、大阪大学、大阪.
- (11) 佐藤皓允、「星間空間における円偏光吸収反応による L 型アミノ酸過剰生成の計算科学的検証」、宇宙生命計算科学連携拠点第 2 回ワークショップ、2016 年 4 月 27 日～28 日、筑波大学、つくば.
- (12) 鬼頭(西岡)宏任、「有機半導体のエキシトン/キャリア輸送現象の理論解析」(ポスター)、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) 第 8 回シンポジウム、会場: THE GRAND HALL、2016 年 7 月 14 日～15 日、品川.
- (13) 鬼頭(西岡)宏任、「Studies on Charge Transfers in Bio-system and Organic Semiconductor by Using Fragment Molecular Orbital Methods」、TIA"かけはし"ポスター交流会、2016 年 8 月 30 日、エポカルつくば、つくば.
- (14) 鬼頭(西岡)宏任、重田育照、「有機ナノ結晶における励起状態ダイナミクスの理論研究」

(ポスター)、第 10 回分子科学討論会、2016 年 9 月 13 日～15 日、神戸ファッションマート、神戸。

#### (4) 著書、解説記事等

- (1) 原田隆平、最近の研究から「カスケード型超並列シミュレーションに基づく遷移経路探索法」、分子シミュレーション研究会誌「アンサンブル」, **18**, 159-167(2016).
- (2) 松井亨、喜屋武茜、庄司光男、重田育照、"プロトンの水和自由エネルギー：酸解離定数および標準水素電極電位の高精度計算"、量子水素の科学（特集号）、日本コンピュータ化学会誌 (invited review)、**15**(5)、184-191 (2016).

### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 宇宙・生命・物性分野間連携（宇宙生命）  
宇宙空間での L-アミノ酸生成に関する研究を物性・宇宙分野と連携して進展させた。
2. 生命情報・分子進化分野間連携  
伸長因子 EF-1 $\alpha$  の立体構造に関する理論的研究を分子進化分野と連携して進展させた。
3. 生命-高性能計算機部門連携  
フラグメント分子軌道法に DFT を利用可能にし、高性能計算機部門と連携して並列化対応を進展させた。

### 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 重田育照、第 77 回岡崎コンファレンス「Ultrafast dynamics in Molecular Science and Material Science」、牛山浩、重田育照、高橋聡、藤井幹也、山下雄史、斉藤真司、Mar 6<sup>th</sup>-8<sup>th</sup> 2017, 岡崎コンファレンスセンター。

### 9. 管理・運営

重田育照

計算科学研究センター 計算生命科学研究部門 部門主任

計算科学研究センター 運営委員会委員

計算科学研究センター 人事委員会委員

計算科学研究センター 運営協議会委員

計算科学研究センター 先端計算科学推進室員

理工学群物理学類 学務委員

理工学群物理学類 広報委員

理工学群物理学類 FD 委員

数理物質系物理学域 生命物理グループ長

数理物質系物理学域 評価委員

## 10. 社会貢献・国際貢献

集中講義

1. 重田育照、「量子化学に基づく化学反応理論」“大学院講義”、愛媛大学大学院医系研究科. (2016 後期)
2. 重田育照、「量子化学に基づく化学反応理論」“大学院講義”、東京大学大学院工学系研究科. (2016 後期)
3. 重田育照、「量子化学に基づく化学反応理論」“大学院講義”、九州大学大学院理学研究科. (2016 前期)

その他

1. Yasuteru Shigeta, Outstanding Reviewers for Physical Chemistry Chemical Physics in 2016. Royal Chemical Society (2016).  
Royal Chemical Society の発刊している「Physical Chemistry Chemical Physics」において、数多くの査読を行い、2016 年度の Outstanding Reviewers として PCCP 誌に掲載された (*Phys. Chem. Chem. Phys.* 2017, **19**, 8140)。

## 11. その他

なし

## V-2. 分子進化分野

### 1. メンバー

教授 稲垣 祐司

研究員 中山 卓郎 (H28 年度 11 月 1 日付で東北大学に転出)

教授 橋本 哲男 (共同研究員・生命環境系)

特任助教 湯山 育子 (生命環境系 ; H28 年 12 月 1 日付で着任)

学生 大学院生 5 名 (後期課程在学 3 名、前期課程在学 2 名)、学類生 1 名

### 2. 概要

分子進化分野では、真核生物の主要グループ間の系統関係解明に向け、主に 3 つの「柱」を設定し研究を進めている。

**【1】新奇真核微生物の発見 ……** 真核生物の多様性の大部分は肉眼で認識することが難しい単細胞生物であるため、これまでの研究では真核生物多様性の全体像を十分に把握しているとは言い切れない。そこで自然環境からこれまでに認識されていない新奇真核微生物を単離・培養株化する。

**【2】各種トランスクリプトーム・ゲノム解析 ……** 真核生物の主要グループ間の系統関係を分子系統学的に解明するには、大規模遺伝子データが必須である。そこで系統進化的に興味深い生物種を選び、培養と遺伝子データの取得を進めている。そのデータを基に、大規模配列データ解析を行い正確な真核生物系統の推測を目指す。

**【3】分子系統解析の方法論研究 ……** 分子系統解析においては、解析する配列データの特長、使用する解析法・配列進化モデルなどにより、系統推定に偏りが生じることが知られている。これまでの方法論は単一遺伝子データに基づいて研究されてきたが、複数遺伝子から構成される大規模配列データを解析するための方法論の検討はそれほど進んでいない。また、現状では超並列計算機上で効率よく作動する解析プログラムも十分に普及しているとは言えない。そこで、大規模配列データ解析においてより偏りの少ない推測を目指し、方法論的研究と系統解析プログラムの並列化を行っている。

### 3. 研究成果

#### 【1】大規模配列データに基づく真核生物大系統の推測

H25 年度末には、我々の研究グループが単離・同定し、正式に記載した *Tsukubamonas globosa* の大規模分子系統解析とミトコンドリアゲノムの完全解読結果を *Genome Biol Evol* 誌に (Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol* 6:306-315)、H26 年度初めには *Palpitomoans bilix* の大

規模分子系統解析の結果を *Sci Rep* 誌に (Yabuki et al. 2014 *Sci Rep* 4:4641)、H28 年度には大規模分子系統解析結果を基盤としてホヤ病原性寄生原虫 *Azumobodo hoyamushi* をふくむキネトプラスト類中の生活様式の進化を発表した (Yazaki et al. 2016 *Genes Genet Systems in press*)。また 159 遺伝子データの系統解析により、嫌気性・微好気性真核微生物から構成されるフォルニカータ生物群の内部系統を頑健に再構築することに成功し、この系統樹を基盤にフォルニカータ生物の縮退ミトコンドリアの機能の進化過程を提案した論文が *Nature Ecology & Evolution* 誌に掲載された (Legar et al. 2017 *Nature Ecology & Evolution in press*)。これまでのところ未発表ではあるが、系統的帰属が未解明な真核微生物 (*Microheliella maris* および *Rigifila ramosa*)、H25 年度から継続して解析を進めている新奇真核微生物 PAP020 株の系統的位置に関する大規模分子系統解析の結果を現在論文に取りまとめている。今回は H26 年度から解析準備を開始した新奇真核微生物 SRT308 株の系統的位置に関する大規模分子系統解析の最終的な結果を中心に、SRT213 および SRT605 株についての研究の進捗も報告する。

#### (1) 新奇真核微生物 SRT308 株の系統的位置の推測

2013 年にパラオ共和国の海水サンプルから新奇単細胞真核生物 SRT308 株が単離、好気環境下で培養株化された (図 1)。これまでの細胞形態観察においても、系統マーカー遺伝子である小サブユニットリボソーム RNA (SSU rRNA) 配列を用いた系統解析においても、SRT308 株はいかなる既知の真核生物と明らかな近縁性を示さず、本生物は真核生物における新奇系統であることが示唆された。H26 年度に SRT308 株のトランスクリプトームデータ取得、H27 年度には 116 遺伝子データを用いた予備的系統解析を行った。H28 年度には 153 遺伝子データを用いた大規模分子系統解析を行い、真核生物系統中での SRT308 株の系統的位置について最終的な結論を得た (図 1)。この解析は、筑波大学計算科学研究センター学際共同利用プログラム REALPHY (15a18; 代表・稲垣祐司) により実施した。153 遺伝子解析では、SRT308 株はキネトプラスト類、ユーグレナ類、ディプロネマ類からなる系統群である Euglenozoa 生物群の基部から分岐することが統計的に強く示され、SRT308 株と Euglenozoa からなる系統は、ヘテロロボサ類、ヤコバ類、ツクバモナス類とともにディスコバ生物群と呼ばれる大きな系統群を形成した (図 1)。今後、Euglenozoa の生物と SRT308 株の微細構造の比較解析によって、SRT308 株が① Euglenozoa 生物群のなかでも最も早期に分岐した系統なのか、② Euglenozoa の内部系統ではなくディスコバ生物群における新奇系統であるのかを明らかにしていく必要がある。H29 年度には、白鳥博士が取得した形態データと 153 遺伝子データに基づく大規模分子系統解析結果をふくむ投稿論文を作成し、投稿することを目指す。

Euglenozoa 生物群を構成するキネトプラスト類、ユーグレナ類、ディプロネマ類のミトコンドリアゲノムは、複数の環状／直鎖状 DNA からなる複雑な構造であることが知ら



れている。本生物群の進化過程でどのようにミトコンドリアゲノム構造が複雑化していったかを推測するためには、まず祖先的なミトコンドリアゲノムの構造を把握する必要がある。我々の大規模分子系統解析から SRT308 株は Euglenozoa 生物群の基部から分岐したことが明らかとなったため、SRT308 株のミトコンドリアゲノム構造の理解は、Euglenozoa 生物群のミトコンドリアゲノム構造の進化を推測する上で極めて重要である。我々は SRT308 株ミトコンドリアゲノム配列と構造の解明を目指し、H28 年度には本生物のゲノムデータを取得した。H29 年度にはこのゲノムデータからミトコンドリアゲノムを再構築することを目指す。

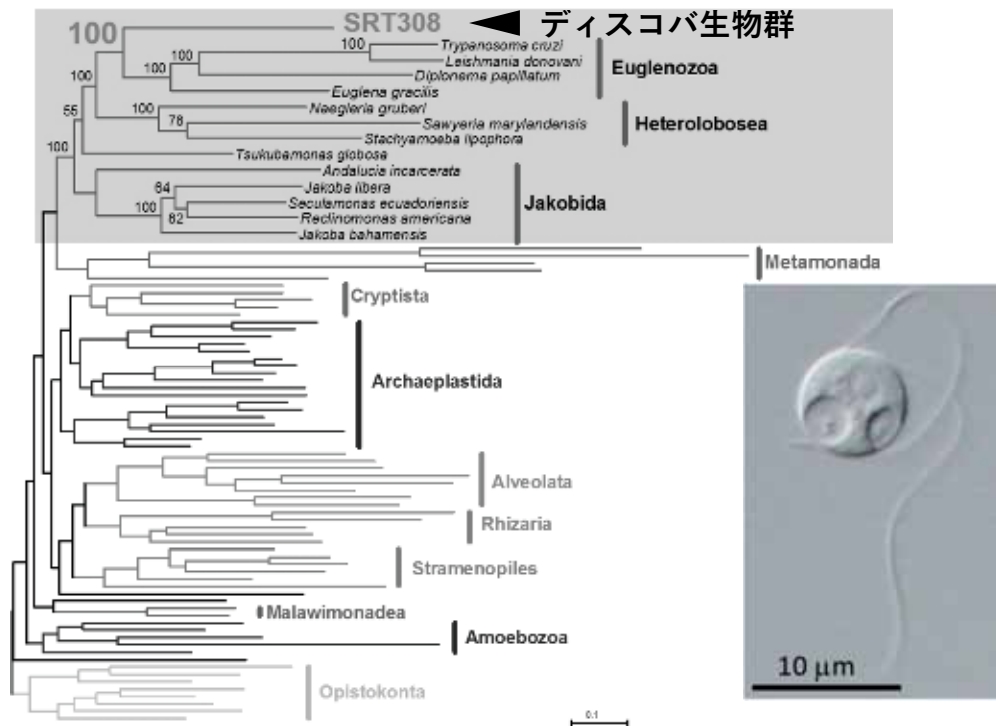


図 1. SRT308 株 [右下, 写真提供: 白鳥峻志 (筑波大)] と 153 遺伝子データに基づくその系統的位置 (矢頭)。

## (2) 新奇真核微生物 SRT605 株および SRT213 株の系統的位置の推測

SRT605 株 (図 2 左) は、白鳥峻志 (筑波大) 博士により静岡県沼津市千本浜公園付近で採取された海水サンプルから単離された真核微生物である。予備的な顕微鏡観察で把握された形態的特徴では、この生物の系統的位置を確定することはできなかった。しかし、小サブユニットおよび大サブユニットリボソーム RNA 遺伝子配列の連結系統解析では、SRT605 株が、ヒトをふくむ多細胞動物と菌類 (とそれらと近縁となるいくつかの真核微生物系統) から構成されるオピストコンタ類の基部から分岐する可能性が示唆され

た。SRT605 株の位置が大規模分子系統解析により確定すれば、この真核微生物は最も祖先的オピストコンタ生物として、あるいはオピストコンタ類に最も近縁な生物として、極めて魅力的な研究対象となる。H28 年度の後半に、SRT605 株のトランスクリプトームデータを取得した。さらに、これまで発表されたオピストコンタに関する大規模系統解析で最もオピストコンタ生物種の多様性をカバーしている Torruella ら (2015 *Curr Biol* 25:2404-2410) の 93 遺伝子アライメントを入手し、SRT605 株のデータを追加している。SRT605 株からの配列データを含む大規模アライメントデータに基づき、H29 年度の筑波大学計算科学研究センター学際共同利用プログラム REALPHY (17a25; 代表・稲垣祐司) の課題の下で COMA システム汎用 CPU 部にて分子系統解析を行う。

SRT213 株 (図 2 右) は、白鳥博士により 2011 年にパラオ共和国のマングローブ底泥より単離され、微好気条件のもと培養株化されたものである。SRT213 株はアメーバ状態と鞭毛をもち遊泳する状態の 2 形態を呈する、いわゆるアメーバ鞭毛虫である。また、予備的な電子顕微鏡観察を行った結果、SRT213 株からは典型的なミトコンドリアを欠き、代わりに二重膜を持つ電子密度の高い細胞小器官が検出された。系統的に広範な微好気および嫌気性真核微生物の細胞内に縮退したミトコンドリア (ミトコンドリア様小器官; Mitochondrion Related Organelles, MROs) が同定されていることから、SRT213 株の持つ二重膜細胞小器官は MRO である可能性が高い。系統マーカー遺伝子である SSU rDNA を用いた系統解析の結果、SRT213 株はヘテロロボサ類に含まれる可能性が示唆されたが、その系統関係は高い統計的サポートを受けず明確な結論が出なかった。我々は、H28 年度に SRT213 株から HiSeq2500 をもちいたトランスクリプトームデータを取得したので、H29 年はこのデータをもとに大規模分子系統解析を行い、SRT213 株の系統的位置を確定する。またトランスクリプトームデータを基盤に、SRT213 株の MRO 機能の全容解明を目指す。

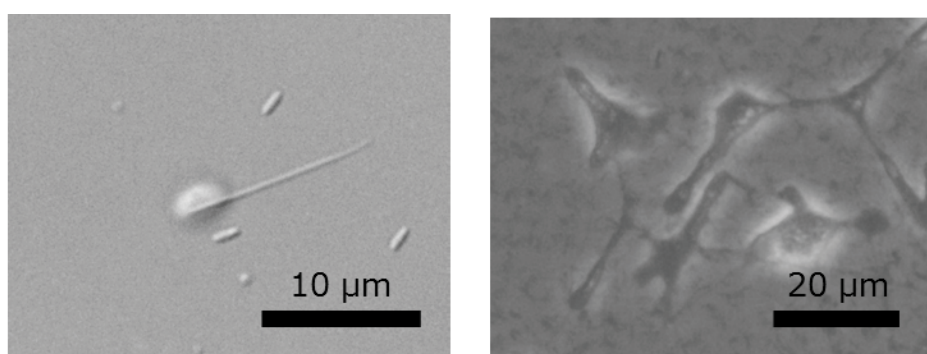


図 2. SRT605 および SRT213 株 (アメーバ状細胞)。写真提供: 白鳥峻志 (筑波大)

## 【2】各種トランスクリプトーム・ゲノム解析

## (1) 窒素固定に特化したシアノバクテリア共生体（橢円体）を細胞内に保持するロパロディア科珪藻のゲノム解読

ロパロディア科珪藻は、ミトコンドリアや色素体に加え、独自のシアノバクテリア共生体を保持する（橢円体, spheroid body）。橢円体は窒素固定能力を持ち、窒素化合物を宿主細胞に供給していると考えられてきた。また橢円体は珪藻細胞外では生育できず、珪藻細胞の分裂とともに娘細胞に受け継がれる。しかし、橢円体が珪藻細胞にどの程度統合されているのか詳細は不明であり、我々はゲノム情報を軸に、珪藻と橢円体の共生関係機構の解明を目指している。これまでに我々はロパロディア科珪藻 *Epithemia turgida* の橢円体ゲノム全塩基配列を報告した（Nakayama et al. 2014 *Proc Nat Acad Sci USA* 111:11407-11412）。また H26 年度以降、さらに 2 種のロパロディア科珪藻 *Rhopalodia gibberula* のおよび *Epithemia adnata* の橢円体ゲノム全塩基配列を決定した。予備的な比較解析により *E. turgida* と *R. gibberula* の橢円体ゲノム間には明らかな違いがみられ、ロパロディア科珪藻の種間で橢円体ゲノム配列に進化的多様性があることが示唆された（未発表データ）。H29 年度には、この 2 つの橢円体ゲノム比較解析結果を取りまとめた論文の投稿を目指す。

H27 年度には、珪藻細胞がどのように細胞内共生体である橢円体を制御しているかの分子的知見を得るため、*E. adnata* の核ゲノムにコードされているタンパク質遺伝子の解析を行い、シアノバクテリアから水平転移によって獲得された遺伝子群を同定した。そのうち 2 つの遺伝子は珪藻細胞内において橢円体特異的に局在するペプチドグリカン壁の代謝に関わるものであり、これらの遺伝子が橢円体の制御に関わっている可能性が示唆された。H28 年度にはこの 2 つのタンパク質に対するマウス抗血清を作成した。H29 年度には、2 つのシアノバクテリア由来ペプチドグリカン代謝関連タンパク質に対する抗血清をもちいた免疫電子顕微鏡観察により、2 つのタンパク質が *E. adnata* 細胞内の橢円体に局在するかどうかを検証する予定である。

## (2) 光合成性真核微生物の色素体ゲノム解析

我々は光合成性真核微生物における葉緑体置換、二次的な光合成能の欠失に伴う色素体ゲノム進化に興味を持ち、各種の真核藻類の色素体ゲノム解読を行っている。

多くの渦鞭毛藻は紅藻の二次共生によって獲得された色素体（ペリディニン色素体）をもつが、これまでの研究により 3 種の渦鞭毛藻、*Lepidodinium chlorophorum*、未記載渦鞭毛藻 2 種（MRD-151 株および TRD-132 株）では、祖先型のペリディニン色素体が、緑藻であるペディノ藻の三次共生に由来する緑藻型の色素体に置換されていることが判明している。興味深いことに上記 3 種は、互いに独立に細胞内共生させたペディノ藻を葉緑体化したと考えられる。従ってこれら 3 種の渦鞭毛藻細胞内のペディノ藻由来緑色葉緑体と自由生活性ペディノ藻葉緑体のゲノムを比較することで、渦鞭毛藻細胞内での

共生とそれに引き続く葉緑体化過程における葉緑体ゲノム進化を検証することが可能である。

我々はこれまでに *L. chlorophorum* 色素体ゲノムを解読し論文として発表 (Kamikawa et al. 2015 **Genome Biol Evol** 7:1133-1140) するとともに、MRD-151 株の色素体の全ゲノム配列を解読した (H27 年度報告; 未発表)。H28 年度は TRD-132 株の葉緑体ゲノム配列の決定を目指し、同株のトータル DNA サンプルを次世代シーケンス解析した。その結果、約 71 Kbp の環状葉緑体ゲノム配列を再構築することに成功し、65 種類の機能既知タンパク質コード遺伝子を同定した。ゲノム比較解析の結果、*L. chlorophorum*、MRD-151 株、TRD-132 株の色素体ゲノムにはコードされる機能既知タンパク質遺伝子のレパートリーは、①互いによく似ていること、②自由生活性ペディノ藻 (例えば *Pedinomonas minor*) の色素体コードの機能既知タンパク質遺伝子レパートリーと比べ、共通して縮退的であることが判明した (図 3)。従って、渦鞭毛藻細胞内で互いに独立して葉緑体化したペディノ藻の色素体ゲノムには、共通してタンパク質遺伝子レパートリーに対して縮小圧がかかったこと、どのような遺伝子が色素体ゲノムから消失するかには何らかの共通した進化的背景が存在する可能性があることが示唆された。H29 年度には、これまで蓄積した MRD-151 株と TRD-132 株の色素体ゲノムデータと、既に論文として公開した *L. chlorophorum* 色素体ゲノムの比較解析結果を論文として取りまとめ、投稿することを目指す。

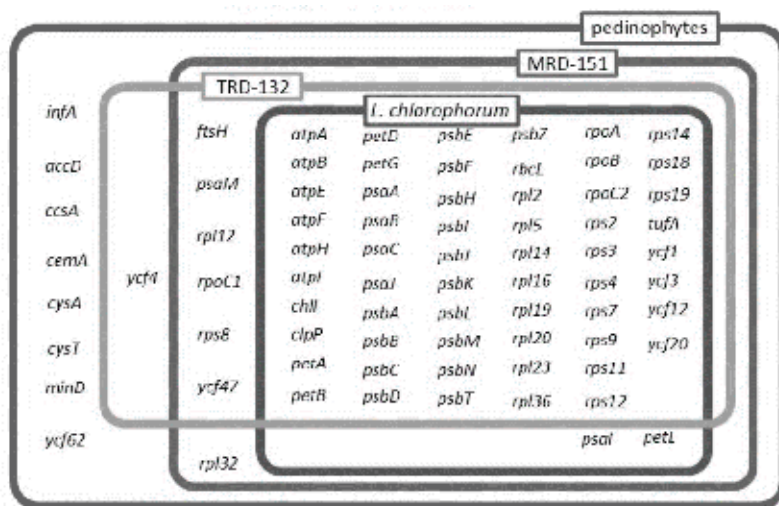


図3. 渦鞭毛藻 *Lepidodinium chlorophorum*, MRD-151 株、TRD-132 株の色素体ゲノムにコードされる機能既知タンパク質遺伝子レパートリーを比較したベン図。渦鞭毛藻色素体にコードされたタンパク質遺伝子は、ペディノ藻 (pedinophytes) 色素体ゲノムにコードされるタンパク質遺伝子のサブセットであった。

### (3) 各種真核微生物のミトコンドリアゲノム解析

ミトコンドリアは細胞内共生した $\alpha$ プロテオバクテリアが退化したオルガネラである。ミトコンドリアの成立は原始真核生物細胞に深く関連し、真核生物の細胞体制とゲノム構造に大きな影響を与えたと考えられている。また真核生物の進化過程で、ミトコンド

リアゲノムにコードされる遺伝子の種類や数、ゲノム構造などが大きく多様化してきた。我々は各種の真核微生物のミトコンドリアゲノムを解読し、その多様性と進化を解明しようとしている。しかしこれまでに配列決定されたミトコンドリアゲノムの大部分は後生動物・菌類、陸上植物からのデータで占められており、真核生物の多様性を網羅しているとは言い難い。これまでに我々は多様な真核微生物のミトコンドリアゲノム解読を進めており、ディスコバ生物群のメンバーである *Tsukubamonas globosa* (Kamikawa et al. 2014 *Genome Biol Evol* 6:306-315)、カタブレファリス類 (*Leucocryptos marina* および *Roombia* sp. NY0200 株; 前者の部分配列は Nishimura et al. 2012 *PLoS ONE* 7:e37307 として発表済み、後者は未発表)、ハプト藻 *Chrysochromulina* sp. NIES-1333 (Nishimura et al. 2014 *Mobile Genet Elements* 4:e29384)、クリプチスタ生物 *Paliptomonas bilix* のミトコンドリアゲノム (Nishimura et al. 2016 *Genome Biol Evol* 8:3090-3098) を決定した。H28 年度には、新たに未記載有中心粒太陽虫培養株 SRT127 のミトコンドリアゲノムを解読することに成功した (図 4)。

興味深いことに、SRT127 ミトコンドリアゲノムにはグループ I (gI) イントロンが多数含まれていた。gI イントロンは自己スプライシングを行うリボザイムの一種であり、スプライシング時にイントロン RNA が特徴的な高次構造を形成する。また gI イントロンは内部にコードしているホーミングエンドヌクレアーゼ (HE) が特定の塩基配列を認識・切断することによって、異なるゲノム間で水平伝播すると考えられている。多様な生物のゲノムに含まれる gI イントロンとその HE、及びイントロンの挿入部位について比較した結果、SRT127 株ミトコンドリアゲノムに含まれている gI イントロンの 1 つが、緑藻類の色素体ゲノム中のイントロンと進化的に近縁であることが判明した。有中心粒太陽虫類と緑藻類は進化的に離れた系統であることから、これらの gI イントロンは水平伝播によって緑藻類の葉緑体ゲノムから有中心粒太陽虫ミトコンドリアゲノム、あるいはその逆方向に伝わったものと考えられる。このような遠縁の生物の異なるオルガネラゲノム間における水平伝播は、タンパク質遺伝子に挿入されている gI イントロンとしては世界でも初めての報告例である。H29 年度には、この SRT127 株ミトコンドリアゲノムの解析結果を論文としてまとめ、投稿する。

#### (4) 色素体を置換した渦鞭毛藻類におけるクロロフィル *a*、ヘム、イソプレネン合成系を構成するタンパク質の起源の推測

典型的な光合成性渦鞭毛藻は紅藻由来ペリディニン色素体をもつが、渦鞭毛藻 *Lepidodinium chlorophorum* は緑藻由来色素体を保有する。この「緑色渦鞭毛藻」は祖先的 (紅藻由来) 葉緑体を喪失し、緑藻を細胞内共生体として獲得・色素体化したと考えられる。一般に細胞内真核藻が色素体化する過程では、細胞内共生体から宿主核ゲノムへの遺伝子水平転移 (EGT) が想定される。緑色渦鞭毛藻の宿主核ゲノムには元々のペリディニン色素体に局在し機能し



ていた色素体遺伝子がコードされたため、EGT により起源は異なるが機能が相同な色素体遺伝子が宿主核ゲノムに重複し、その後機能的相同遺伝子間の取捨選択が起こった予想できる。しかし現存する渦鞭毛藻細胞内での緑色色素体成立過程において、宿主-共生体間での EGT による遺伝子重複とその後の取捨選択の全体像は明らかにされていない。そこで、互いに独立にペリディニン色素体を緑色色素体に置換したと考えられる 3 つの系統、すなわち *L. chlorophorum* と未記載渦鞭毛藻 2 種 TRD-132 および MRD-151 株の発現遺伝子データを取得し、色素体に局在するクロロフィル *a* (Chl *a*) 合成系、イソプレネン (IPP) 合成系およびヘム合成系を構成するタンパク質コード遺伝子の探索と、系統解析による各タンパク質の起源推測を行った。興味深いことに、3 つの色素体代謝系に関して緑色渦鞭毛藻間でのタンパク質の進化的起源については共通の傾向を示した。IPP 合成系およびヘム合成系では宿主由来のタンパク質遺伝子発現が保存的であり、特に IPP 合成系では EGT 遺伝子が全く検出されなかった。一方 Chl *a* 合成系では緑藻由来の EGT 遺伝子とともに、とくにクロララクニオン藻との近縁性を示す遺伝子を複数検出した。これまで色素体置換に伴うゲノム・遺伝子の進化において特定の系統（今回はクロララクニオン藻）からの大きな貢献は予想外であり、H29 年度にはこの研究成果を投稿論文として取りまとめてゆく予定である。

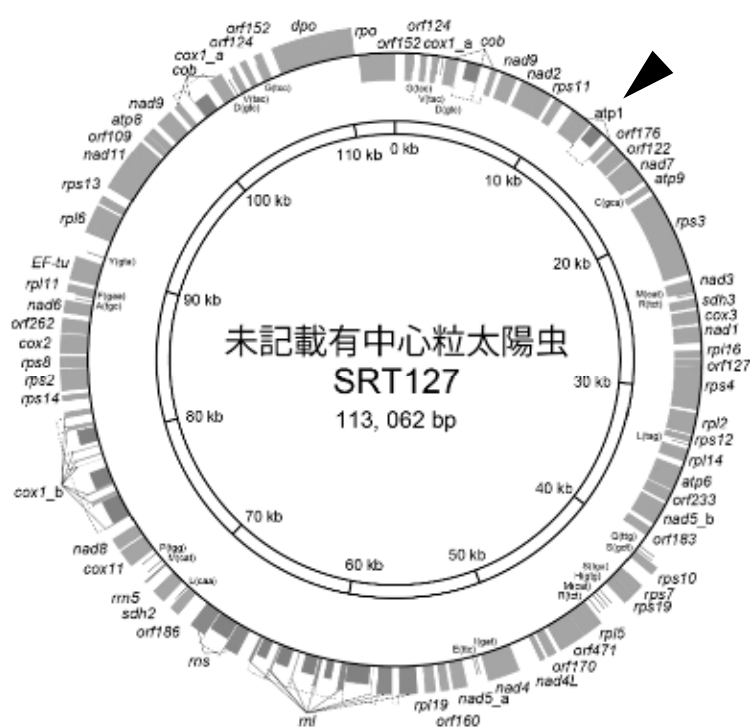


図 4. 未記載有中心粒太陽虫 **SRT127** のミトコンドリアゲノムの概要。全長は約 113Kbp と推測された。薄い色のボックスはタンパク質遺伝子を、濃い色のボックスはリボソーム RNA 遺伝子を示す。線は tRNA 遺伝子を示す。高さに低いボックスは、イントロン内部にコードされるホーミングエンドヌクレアーゼを示す。色素体から水平転移したと推測されたイントロン(含むホーミングエンドヌクレアーゼ)は矢頭で示した。

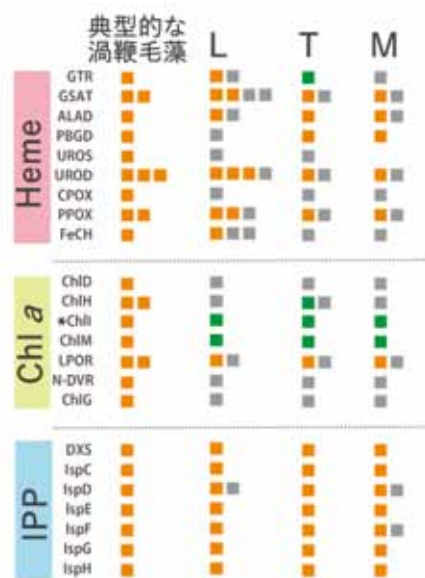


図 5. 互いに独立にペリディニン色素体を緑色色素体と置換したと考えられる 3 つの渦鞭毛藻における、3 つの葉緑体局在代謝系を構成するタンパク質の起源。"L"は *Lepidodinium chlorophorum*、"T"は TRD-132 株、"M"は MRD-151 株を示す。ヘム合成系 (Heme)、クロロフィル a 合成系 (Chl a)、イソプレネン (IPP) 合成系を構成するタンパク質の進化的起源を色分けで示した。オレンジ色はペリディニン色素体をもった祖先渦鞭毛藻から垂直伝播したと考えられるタンパク質、緑色は現在の緑色色素体の起源である緑藻から EGT により獲得したと考えられる遺伝子、灰色は祖先渦鞭毛藻からでも共生緑藻からでもない生物から水平的に獲得したタンパク質を示す。

### 【3】分子系統解析の方法論研究

#### (1) ミトコンドリアタンパク質予測プログラムの改良

ゲノム・トランスクリプトーム解析によって得られた大規模配列データを基にした研究では、タンパク質そのものを対象として個別に生化学的な実験を行うことは困難である。そのため、計算機によるバイオインフォマティクスの手法を用いた *in silico* 解析が必須となっている。そのような解析によく用いられるソフトウェアの 1 つとして、タンパク質配列のみを入力し、そのタンパク質がミトコンドリアに輸送されるか否かを予測するソフトウェアがある。これまでに存在したソフトウェアはほぼ全てが、モデル生物と呼ばれるごく一部のグループから得られたデータのみを学習データとして利用していたため、このソフトウェアによる予測をモデル生物以外の生物（非モデル生物）に適用した場合、予測精度に問題が生ずることが分かっている。この問題点は特に嫌気環境に適応した真核微生物が持つ縮退的なミトコンドリア (MROs) に顕著である。この問題を解決するために、本研究では、①非モデル生物由来のデータを広範に取り入れたデータセットを構築して学習データとし、②学習方法として勾配ブースティング (GBM) を採用した分類器を提案した。

具体的には、①各種データベースから、真核生物系統を広範にカバーするように 12 の生物群を対象として、ミトコンドリアタンパク質か否かのラベル付けがされているタンパク質配列データを約 7500 レコード取得した。ラベルの正確性に疑問が残るものについては、その情報の基となっている原著論文において実験的な裏付けが為されているか精査することによって、学習データとして相応しい信頼性を確保した。②既存手法のうち最も高いパフォーマンスを示す分類器では学習手法としてサポートベクターマシン

(SVM) が用いられていたが、これに対して提案手法ではアンサンブル学習の 1 つである GBM を採用し高次元の特徴量ベクトル・大量のデータに対する学習への適応を図った。このようにして非モデル生物におけるミトコンドリアタンパク質の予測精度向上を図った分類器を作成した。

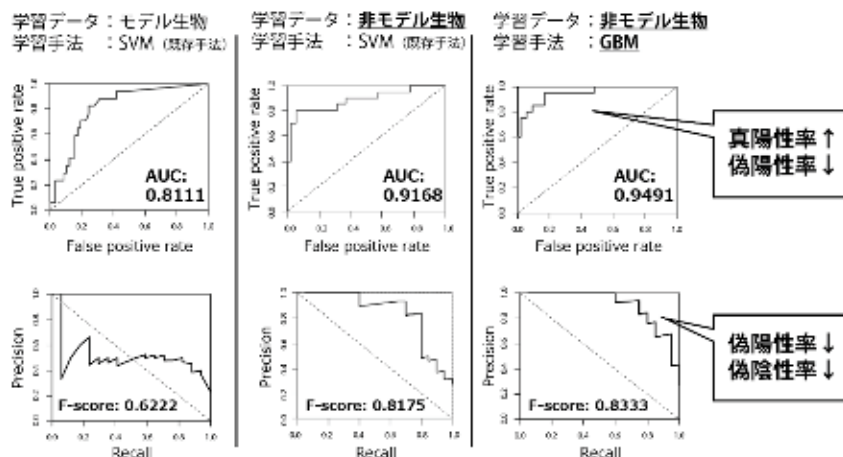


図 6. 既存研究と本研究との比較実験結果. GBM を用いて非モデル生物データを学習させたところ予測精度が向上した (右列) .

この分類器のパフォーマンスを評価するため、既存手法との比較実験を行った。その結果、非モデル生物のミトコンドリアタンパク質の予測において提案手法は既存研究と同等以上の精度を示し、特に縮退ミトコンドリアタンパク質の予測において提案手法は既存研究を大きく上回る精度を達成したことが分かった (図 6 右列)。学習手法を既存研究のものから変更せず、学習データのみを提案手法のものに更新しても精度が向上していることから (図 6 中列)、①非モデル生物を取り入れた学習データの構築と更新および②GBM の採用の両方が予測精度向上に貢献していると言える。現在この成果を発表するため、論文執筆中である。本研究成果は、システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻/生命環境科学研究科生物科学専攻 デュアルディグリープログラムの研究成果の一部である。

## (2) 大規模遺伝子配列データに基づく分子系統解析の GPU 並列化

近年における大規模分子系統解析では数百以上の系統および遺伝子数からなる巨大アライメントが頻繁に用いられている。そのような解析では「系統間における遺伝子配列進化プロセスの不均一性」を考慮し、系統間で異なる進化プロセスをそれぞれ独立したパラメータとして推測する置換モデル (Non-Homogeneous モデル) の適用が推奨される。しかし、Non-Homogeneous モデルでは推測すべきパラメータ数が遺伝子配列データの配列数・座位数に応じて飛躍的に上昇し、実験室レベルの計算機では系統樹推測に数十日もの時間を要する問題が生じる。そのため、Non-Homogeneous モデルに基づく高速な分子系統解析を可能にするプログラムの開発は進化生物学における重要な計算科学的課題



である。そこで本研究では計算科学研究センター・高性能計算システム研究部門との連携のもと、HA-PACS システム上での分子系統解析プログラムの GPU 並列化を目指した。

本年度における研究では、既存のプログラムである「NHML」(Galtier & Gouy *Mol Biol Evol* 1998 15:871-879) を対象に、本プログラムを用いた系統樹の尤上記の並列化による性能向上を確認するため、COMA システムにて最大 32 ノード (512 コア) までを利用し、17 種 10,000 座位からなるシミュレーションデータを用い、評価試験を行った。結果、32 ノード使用時において、128 の MPI プロセスを 1 グループ 4 プロセス (16 スレッド) の計 32 グループに分割し、それぞれのグループで異なる提案樹形の尤度計算を並列に処理することで、1 コアでの逐次処理に比べ 187.3 倍の高速化を達成した (図 7)。また、上記スキームによる並列化を、MPI プロセスをグループ分割しない H26 年度までの並列スキームと比較したところ、512 コア使用時に 2.79 倍の高速化を達成できたことから、より多くの計算資源を必要とする大規模分子系統解析に適したものであると評価できる。本成果は H28 年度学際共同利用プログラム (16a-46, 代表: 石川) によるものである。H29 年度ではこれらの成果を論文として国際学会に投稿するとともに、更なる高速化のために①のアルゴリズムに GPU 並列計算技術を導入する予定である (H29 年度学際共同利用プロジェクト 17a-52)。

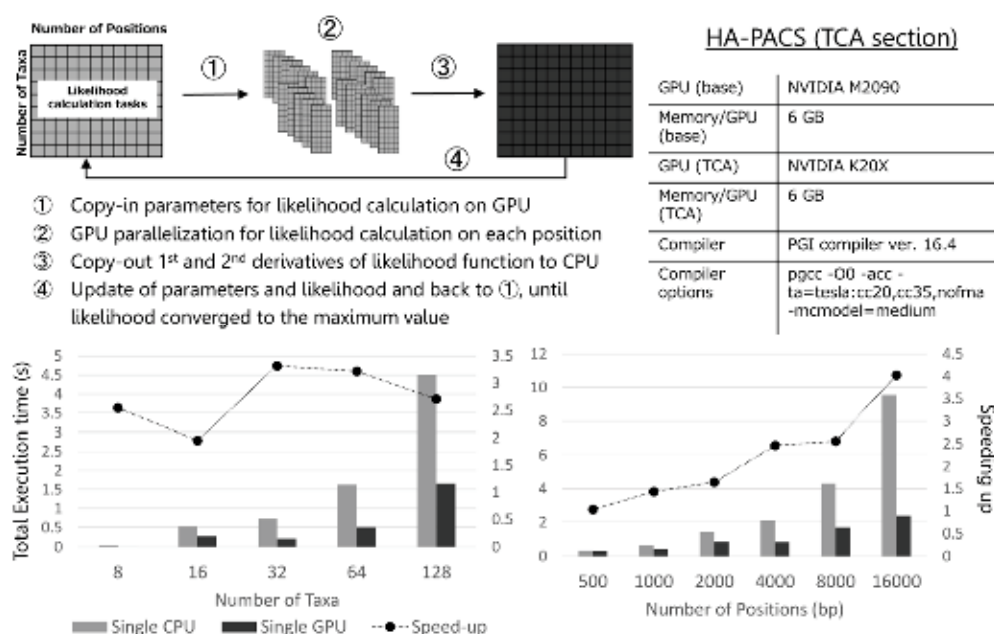


図 7. NONHOMO プログラムにおける系統樹の尤度計算アルゴリズムの GPU 並列化および HA-PACS システムにおける性能評価。

#### 4. 教育

##### (1) 博士論文

- A) 矢崎裕規 “Large-scale, Multi-gene Phylogenetic Analyses of Previously Overlooked Microeukaryotes: Toward Better Understanding of the Evolution and Diversity of Eukaryotes.” (生命環境科学研究科生物科学専攻)
- (2) 修士論文
- A) 井上貴史 「*Dysnectes brevis* のミトコンドリア関連オルガネラ機能の推測とフォルニカータ生物におけるミトコンドリアの縮退過程の解明」 (生命環境科学研究科生物科学専攻)
- B) 久米慶太郎 「機械学習を用いたミトコンドリア及び関連オルガネラタンパク質の予測手法」 (システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻/生命環境科学研究科生物科学専攻 デュアルディグリープログラム)
- (3) 卒業論文
- A) 杉崎 真 「新規トランススプライシング機構を有する遺伝子の検索ツール開発と評価」 (生命環境学群生物学類)
- (4) 集中講義
- 橋本哲男 : 「核酸・タンパク質配列データにもとづく生物進化の推測」  
計算科学リテラシー (日・英)

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

- (1) 受賞
- A) 矢崎裕規 (博士後期課程 3 年) 筑波大学大学院生命環境科学研究科 研究科長表彰.
- B) 矢崎裕規 (博士後期課程 3 年)、松尾恵梨子 (博士後期課程 2 年)、久米慶太郎 (博士後期課程 2 年)、宮田凌佑 (博士前期課程 1 年)、計 4 名 ICES 2016 トラベルアワード
- (2) 外部資金 (名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)
- A) 科学研究費補助金基盤研究 (B) 「新型分割イントロンのスプライシング機構と進化多様性の解明 (課題番号 15H04406)」, 橋本哲男 (分担; 稲垣祐司), 研究期間: 2015-2017 年度, 交付額: 直接経費 5,500 千円, 間接経費 1,650 千円.
- B) 科学研究費補助金基盤研究 (B) 海外学術「嫌気環境に生育する真核微生物の多様性の解明 (課題番号 15H05231)」, 橋本哲男 (分担; 稲垣祐司), 研究期間: 2015-2017 年度, 交付額: 直接経費 5,200 千円, 間接経費 1,560 千円.
- C) 科学研究費補助金基盤研究 (B) 「渦鞭毛藻細胞内に発見された新たな共生体痕跡核ゲノムの解析 (課題番号 16H04826)」, 稲垣祐司, 研究期間: 2016-2018 年度, 交付額: 直接経費 5,700 千円, 間接経費 1,710 千円.

- D) 科学研究費補助金基盤研究 (B) 「海洋バクテリアの長期炭素隔離機能に対する海洋酸性化の影響評価 (課題番号 16H02967)」, 濱健夫 (分担; 稲垣祐司), 研究期間: 2016-2019 年度, 交付額: 直接経費 14,000 千円, 間接経費 4,200 千円.
- E) 科学研究費補助金基盤研究 (C) 「マトリョーシカ型進化原理の展開 (16H01703)」, 野崎智義 (分担; 稲垣祐司), 研究期間: 2016 年度, 交付額: 直接経費 3,000 千円, 間接経費 900 千円.
- F) 科学研究費補助金若手研究 (B) 「ケルコゾア生物における “ミトコンドリア型解糖系” の理解に向けた基礎的研究 (課題番号 23247038)」, 中山卓郎, 研究期間: 2014-2016 年度, 交付額: 直接経費 500 千円, 間接経費 150 千円.
- (3) 知的財産権 (種別、氏名、課題名、年月日)  
なし

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

- ① Leger MM, Kolisko M, Kamikawa R, Stairs CW, Kume K, Čepička I, Silberman JD, Andersson JO, Xu F, Yabuki A, Takishita K, Inagaki Y, Simpson AGB, Hashimoto T, Roger AJ. Organelles that illuminate the origins of *Trichomonas* hydrogenosomes and *Giardia* mitosomes. 2017 *Nature Ecology & Evolution* in press.
- ② Yazaki E, Ishikawa SA, Kume K, Kumagai A, Kamaishi T, Tanifuji G, Hashimoto T, Inagaki Y. Global Kinetoplastea phylogeny inferred from a large-scale multigene alignment including parasitic species for better understanding transitions from a free-living to a parasitic lifestyle. 2017 *Genes & Genetic Systems* in press.
- ③ Nishimura Y, Tanifuji G, Kamikawa R, Yabuki A, Hashimoto T, Inagaki Y. Mitochondrial genome of *Palpitomonas bilix*: Derived genome structure and ancestral system for cytochrome *c* maturation. 2016 *Genome Biology and Evolution* 8:3090-3098.
- ④ Nishimura Y, Amagasa T, Inagaki Y, Hashimoto T, Kitagawa H. A system for supporting phylogenetic analyses over alignments of next generation sequence data. *Proceedings for the 10<sup>th</sup> International Conference on Complex, Intelligent, and Software Intensive Systems (CISIS-2016)* 230-237.
- ⑤ Templeton T, Asada M, Jiratanh M, Ishikawa SA, Tiawsirisup S, Sivakumar T, Namangala B, Takeda M, Mohkaew K, Ngamjituea S, Inoue N, Sugimoto C, Inagaki Y, Suzuki Y, Yokoyama N, Kaewthamasorn M, Kaneko O. Ungulate malaria parasites. 2016 *Scientific Reports* 6:23230.

B) 査読無し論文

- ① 中山卓郎, 稲垣祐司. シアノバクテリアと真核藻類の細胞統合—「窒素固定オルガネラ」へ続く道? 2016 *生物の科学 遺伝* 70:176-180.
- ② 稲垣祐司. 共生体由来オルガネラにまつわるエトセトラ. 2016 *生物の科学 遺伝* 70:156-160.

(2) 国際会議発表 (発表者には\*を付けた)

A) 招待講演

なし

B) 一般講演

- ① \*Euki Yazaki, Takashi Shiratori, Tetsuo Hashimoto, Ken-ichiro Ishida, Yuji Inagaki. 153 genes phylogenetic analysis indicated a newly single-celled eukaryote, strain SRT308, as a deep-branching Euglenozoan. 2017 年 3 月 27 日-3 月 29 日 Genome Evolution at Mishima. National Institute for Genetics, Mishima, Japan.
- ② \*Euki Yazaki, Takashi Shiratori, Tetsuo Hashimoto, Ken-ichiro Ishida, Yuji Inagaki. A phylogenomic study placed a previously undescribed eukaryote, strain SRT308, at the base of the Euglenozoa clade. 2016 年 9 月 11 日-9 月 14 日 13<sup>th</sup> International Colloquium on Endocytobiology and Symbiosis (ICES 2016). Inamori Memorial Hall in Kyoto Prefectural University, Kyoto, Japan.
- ③ \*Goro Tanifuji, Ryoma Kamikawa, Christa E. Moore, Tyler Mills, Yuji Inagaki, Tetsuo Hashimoto, John M. Archibald. Plastid comparative genomics elucidates multiple independent losses of photosynthesis in *Cryptomonas* (Cryptophyta). 2016 年 9 月 11 日-9 月 14 日 13<sup>th</sup> International Colloquium on Endocytobiology and Symbiosis (ICES 2016). Inamori Memorial Hall in Kyoto Prefectural University, Kyoto, Japan.
- ④ Kevin Wakeman, \*Takuro Nakayama, Goro Tanifuji, Eriko Matsuo, Brian Leander, Yuji Inagaki. Phylogenetic positions of marine gregarines *Selenidium terebellae* and *Lecudina tuzetae*, and molecular evidence of their remnant nonphotosynthetic plastids (apicoplasts). 2016 年 9 月 11 日-9 月 14 日 13<sup>th</sup> International Colloquium on Endocytobiology and Symbiosis (ICES 2016). Inamori Memorial Hall in Kyoto Prefectural University, Kyoto, Japan.
- ⑤ \*Eriko Matsuo, Yuji Inagaki. Differential impacts of plastid replacement on plastidal biosynthetic pathways in dinoflagellates with non-canonical plastids, *Karlodinium veneficum* and *Lepidodinium chlorophorum*. 2016 年 9 月 11 日-9 月 14 日 13<sup>th</sup> International Colloquium on Endocytobiology and Symbiosis (ICES 2016). Inamori Memorial Hall in Kyoto Prefectural University, Kyoto, Japan.

- ⑥ \*Ryosuke Miyata, **Takuro Nakayama**, Goro Tanifuji, Yasuhiko Chikami, Kensuke Yahata, **Yuji Inagaki**. Gregarine-like apicomplexan parasite isolated from the intestinal tract of a centipede *Scolopocryptops rubiginosus*. 2016 年 9 月 11 日-9 月 14 日 13<sup>th</sup> International Colloquium on Endocytobiology and Symbiosis (ICES 2016). Inamori Memorial Hall in Kyoto Prefectural University, Kyoto, Japan.
- ⑦ \*Ryoma Kamikawa, Stefan Zauner, Daniel Moog, Goro Tanifuji, Ken-ichiro Ishida, Shigeki Mayama, **Tetsuo Hashimoto**, John M Archibald, Andrew J Roger, Uwe-G Maier, Hideaki Miyashita, **Yuji Inagaki**. Loss of the Calvin Benson cycle in non-photosynthetic plastids. 2016 年 9 月 11 日-9 月 14 日 13<sup>th</sup> International Colloquium on Endocytobiology and Symbiosis (ICES 2016). Inamori Memorial Hall in Kyoto Prefectural University, Kyoto, Japan.
- ⑧ \*Mitsuhiro Matsuo, Atsushi Katahata, Soichirou Satoh, Motomichi Matsuzaki, Mami Nomura, Ken-ichiro Ishida, **Yuji Inagaki**, Junichi Obokata. Evolutionary roles of SL-*trans*-splicing in the primary endosymbiosis. 2016 年 9 月 11 日-9 月 14 日 13<sup>th</sup> International Colloquium on Endocytobiology and Symbiosis (ICES 2016). Inamori Memorial Hall in Kyoto Prefectural University, Kyoto, Japan.
- ⑨ Yuki Nishimura, \*Toshiyuki Amagasa, **Yuji Inagaki**, **Tetsuo Hashimoto**, Hiroyuki Kitagawa. A system for phylogenetic analyses over alignments of next generation sequence data. 2016 年 7 月 6 日-7 月 8 日 11<sup>th</sup> International Conference on Complex, Intelligent, and Software Intensive Systems (CISIS-2016). Fukuoka Institute of Technology, Fukuoka, Japan.
- ⑩ \*Takashi Shiratori, Euki Yazaki, **Yuji Inagaki**, **Tetsuo Hashimoto**, Ken-ichiro Ishida. Characterization of strain SRT308; a new heterotrophic flagellate basal to Euglenozoa. 2016 年 6 月 6 日-6 月 10 日 Protist-2016. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia.
- ⑪ \*Eriko Matsuo, **Yuji Inagaki**. Trends in endosymbiotic gene transfer on plastid metabolic pathways in dinoflagellates with non-canonical plastids. 2016 年 6 月 6 日-6 月 10 日 Protist-2016. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia.
- ⑫ \*Goro Tanifuji, Sun Takabayashi, Keitaro Kume, Mizue Takagi, **Yuji Inagaki**, **Tetsuo Hashimoto**. The draft genome of *Kipferlia bialata* reveals that the gain of function contributes the massive reductive evolution in Metamonada. 2016 年 6 月 6 日-6 月 10 日 Protist-2016. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia.
- ⑬ \***Takuro Nakayama**, **Yuji Inagaki**. Cyanobacterial genes in the nuclear genome of a diatom bearing N<sub>2</sub>-fixing cyanobacterial endosymbionts: Potential factors involved in the

host-endosymbiont partnership. 2016 年 6 月 6 日-6 月 10 日 Protist-2016. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia.

(3) 国内学会・研究会発表（発表者には\*を付けた）

A) 招待講演

- ① \*稲垣祐司. 窒素固定珪藻と緑色渦鞭毛藻：一次共生と二次共生を解き明かす新しいモデルとして. 2017 年 3 月 21-22 日 蛋白研セミナー “真核細胞のオルガネラ研究最前線”. 大阪大学蛋白質研究所, 吹田市, 大阪.
- ② \*矢崎裕規, 白鳥峻志, 久米慶太郎, 橋本哲男, 石田健一郎, 稲垣祐司. 真核生物進化の空白を埋める！分子系統解析が解き明かすプロティストの系統関係. 2016 年 8 月 25-28 日 日本進化学会第 18 回大会. 東京工業大学大岡山キャンパス, 目黒区, 東京.
- ③ \*中山卓郎, 稲垣祐司. 窒素固定はじめました – Rhopalodia 科珪藻に見る細胞内共生進化. 2016 年 8 月 25-28 日 日本進化学会第 18 回大会. 東京工業大学大岡山キャンパス, 目黒区, 東京

B) その他の発表

- ① \*松尾恵梨子, 高橋和也, 皿井千裕, 岩滝光儀, 稲垣祐司. 系統的に独立な緑色渦鞭毛藻における代謝系進化パターンの類似性とその進化的背景. 2017 年 3 月 24-25 日 日本藻類学会第 41 回大会, 高知大学朝倉キャンパス, 高知市, 高知.
- ② \*宮田凌佑, 松尾恵梨子, 中山卓郎, 谷藤吾朗, 千頭康彦, 八畑謙介, 橋本哲男, 稲垣祐司. セスジアカムカデ中のグレガリナ様寄生虫における非光合成性色素体. 2017 年 3 月 24-25 日 日本藻類学会第 41 回大会, 高知大学朝倉キャンパス, 高知市, 高知.
- ③ \*松尾充啓, 瀧端篤, 水口洋平, 野口英樹, 豊田敦, 藤山秋佐夫, 鈴木穰, 佐藤壮一郎, 中山卓郎, 神川龍馬, 野村真未, 稲垣祐司, 石田健一郎, 小保方潤一. 真核光合成生物はどのように生まれたか？– 光合成有殻アメーバのゲノム解析から見えてきた一次細胞内共生進化の初期プロセス. 2016 年 3 月 15 日 第 19 回植物オルガネラワークショップ 鹿児島大学郡元キャンパス, 鹿児島市, 鹿児島.
- ④ \*中山卓郎, 稲垣祐司. 窒素固定シアノバクテリア共生体をもつ珪藻の核ゲノム解析：核にコードされる共生体制御遺伝子の探索. 2016 年 3 月 19-20 日 第 80 回日本植物学会, 沖縄コンベンションセンター, 宜野湾市, 沖縄.
- ⑤ \*久米慶太郎, 天笠俊之, 橋本哲男, 北原博之. 機械学習を用いた非モデル生物におけるミトコンドリア及び関連オルガネラタンパク質の予測手法. 2016 年 7 月 4-6 日 情報処理学会 第 108 回 MPS・第 46 回 BIO 合同研究発表会, 沖縄科学技術大学院大学, 沖縄.

(4) 著書、解説記事等

- ① 稲垣祐司, 中山卓郎. 第 17 章 現在も続く細胞内共生細菌のオルガネラ化. 2016 共生微生物 (化学同人) 大野博司編 p190-201. ISBN 9784759817287

## 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

### (1) 異分野連携

- A) 高性能計算システム研究部門との連携による分子系統解析プログラムの GPU 並列化
- B) 計算情報学研究部門・データ基盤分野との機械学習を用いたオルガネラタンパク質の予測手法の改良

### (2) 国際連携

- A) A. J. Roger 博士 (Dalhousie 大・カナダ) および A. G. B. Simpson 博士 (Dalhousie 大・カナダ) との共同研究：フォルニカータ生物群における嫌気性ミトコンドリア機能の解析
- B) A. J. Roger 博士 (Dalhousie 大・カナダ)、A. G. B. Simpson 博士 (Dalhousie 大・カナダ)、M. W. Brown 博士 (アメリカ・ミシシッピ州立大) との共同研究：大規模遺伝子配列データに基づく真核生物大系統の推測
- C) M. Eliáš 博士 (Ostrava 大学・チェコ共和国) との共同研究：広範な真核生物系統における Rab-like 遺伝子の進化

### (3) 国際活動

なし

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- (1) 蛋白研セミナー“真核細胞のオルガネラ研究最前線”。開催場所：大阪大学蛋白質研究所, 吹田市, 大阪, 日時：2017 年 3 月 21-22 日, オーガナイザー：中井正人 (大阪大学)、野崎智義 (国立感染症研究所)、稲垣祐司。

## 9. 管理・運営

なし

## 10. 社会貢献・国際貢献

なし

## 11. その他

なし



## VI. 地球環境研究部門

### 1. メンバー

教授	田中 博（センター勤務）、日下博幸（センター勤務） 植田宏昭（学内共同研究員）
助教	松枝 未遠（センター勤務）
研究員	木村富士男（センター勤務）、山上 晃央（センター勤務）、 池田 亮作（センター勤務）、Doan Quang Van（センター勤務）
学生	大学院生 23名、学類生 7名

### 2. 概要

地球環境部門における主な活動として、都市気象研究と将来の地域気候予測研究がある。本センターと多治見市の連携協定に基づき、多治見市の熱環境の緩和策に資する観測研究を行っている。多治見市との共同プロジェクトでは、多治見駅付近の熱環境を詳細に調査するとともに、人が感じる温度（体感温度）や人体生理測定（皮膚温など）を行い、ドライミスト、ウェットミスト、街路樹、高反射性舗装道路の効果を評価した。環境省のS8プロジェクトでは、これまで開発してきた「温暖化ダウンスケーラ」をインドネシア気候・気象・地球物理庁（BMKG）に導入した。このソフトウェアの導入により、今後、途上国が独力で地域の温暖化予測ができるようになると期待される。

地球環境学部門における活動のひとつとしては、北極振動と北極温暖化増幅の分析がある。大気場の主要な自然変動としての北極振動の観点からハイエイトスの原因を究明している。また、線形傾圧モデル(LBM)を用いて北極振動の特異固有解理論を発展させ、北極振動指数(AOI)の正負に伴う傾圧不安定解の構造変化を解析した。また、大気大循環のエネルギースペクトルの研究を推進している。地球規模の乱流エネルギースペクトルは、総観規模のエネルギーソースから大気境界層のエネルギーシンクへ向かうエネルギーとエンストロフィーカスケードにより、慣性小領域で波数の - 3乗則が形成されるが、傾圧不安定によるエネルギーソースの存在によりこの慣性小領域理論の仮定が成り立たない。これに代わる理論として、ロスビー波の飽和理論による乱流エネルギースペクトルの形成が新たに提唱されている。

さらに、地球環境部門における活動として、世界各国の気象庁により日々行われているアンサンブル予報データを用いた、数日から数ヶ月先までの大気現象を対象とした予測可能性研究がある。科研費・研究活動スタート支援では、世界各地で起こる天候レジームの1週間先までの予測可能性を解析し、文科省・北極域研究推進(ArCS)プロジェクトでは、1-2ヶ月先までを対象とした熱帯から極域までの諸大気海洋現象の予測可能性についての解析を推進している。

### 3. 研究成果

#### 【1】 天候レジームの予測可能性（学術研究助成基金助成金（若手研究(B)）

極端高低温や極端降水に関連する天候レジームの予測可能性について、冬季欧州、夏季欧州、冬季太平洋、および、冬季アジア域を対象に、1-2 週間先を対象とする中期アンサンブル予報(TIGGE)データにより調査した。冬季欧州域については、2006/07 年以降、北大西洋振動の負位相(NAO-)の予測可能性が高いことが示された。しかしながら、これは、数値予報モデルが予報時間と共に NAO-を好むようになること、2006/07 年以降の NAO-活発であったことに由来しており、NAO-が不活発であった 2006/07 年以前は、むしろ NAO-の予測可能性は他の天候レジームよりも低いことが分かった。また、熱帯大気卓越変動である、マッデン・ジュリアン振動(MJO)の位相の違いにより、天候レジームの予測精度に違いが見られた。夏季欧州域については、従来から用いられてきた 4 つの天候レジームではなく 5 つの天候レジームに分類することが妥当であることを見出すと共に、それらの予測可能性について調査した。冬季ほど明瞭ではないが、天候レジーム間で予測精度に差が見られた。冬季太平洋域についても、従来からの研究とは異なり 5 つの天候レジームに分類する方が妥当であることを示したうえで、天候レジーム間の予測精度の差や MJO の位相と天候レジームの予測精度の関係について調査した。冬季アジア域に関しては、熱帯と中高緯度それぞれを起源とする天候レジームサーキット(ある天候レジームから複数の天候レジームを経て元の天候レジームに戻る)が頻繁に見られること、天候レジームにより予測精度に差があること、MJO の位相により天候レジームの予測精度に差があることなどを示した。

また、ブロッキング現象の予測可能性に関しても過去 10 年分のアンサンブル予報データにより調査した。現業数値予報モデルにおける再現性は 15 日先であっても十分改善されているものの極端な現象に関しては再現性が低いこと、その予測精度には季節・地域差が見られることなどを示した。

#### 【2】 北極低気圧の予測可能性に関する研究（北極域研究推進プロジェクト ArCS）

北極低気圧に関する予測可能性研究では、その時空間スケールが特に顕著であった 2012 年 8 月と 2016 年 8 月の北極低気圧に注目し、現業数値予報モデルが北極低気圧をどの程度予測できるのかを調査した。

2012 年 8 月の北極低気圧については、最盛期の 2・3 日前からでないと、現業数値予報モデルがその発達をよく予測できなかった(図 1)。また、2012 年 8 月の北極低気圧の発達を正確に予測するためには、北極低気圧とシベリア上から北極海に進入した低気圧との併

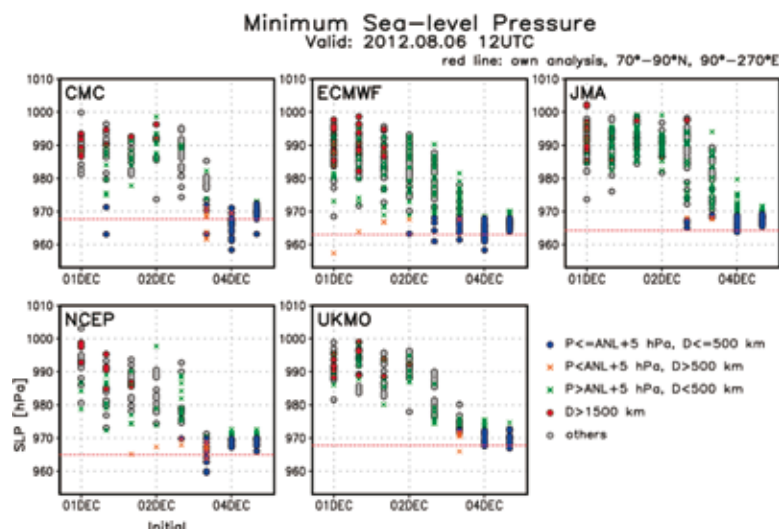


図 1 カナダ(CMC)、欧州(ECMWF)、日本(JMA)、米国(NCEP)、英国(UKMO)の気象局による北極低気圧の中心気圧予測精度の比較

合と、それに伴う上層の暖気核の発達の正確な予測が重要であることが示された。低気圧の併合には 2 つの低気圧の位置関係が重要であり、北極域へ進入してくる低気圧の経路が正しく予測できること、北極域に存在する低気圧の位置が正確であることが重要であることが示された。これらの低気圧の位置を決定する要因として上層のトラフとリッジ、極渦の発達度合いと位置が重要であることが示唆された。

2016 年 8 月に発生した北極低気圧については、複数回の低気圧の併合を経て、発生から一ヶ月以上持続したことが分かった。さらに、2012 年 8 月の北極低気圧と同程度まで発達した直前には、中緯度からの低気圧と北極低気圧との併合が見られた。この北極低気圧についても同様に予測可能性の解析を行ったところ、2012 年 8 月とは異なり、発達の予測は数値予報センターにより大きく異なっていた。予測精度の最も低いセンターで最盛期の 3 日前、良いセンターで最盛期の 6 日前を初期日とする予報から低気圧の発達をよく予測できており、夏季の北極低気圧の発達の予測精度は事例により大きなばらつきがあることが分かった。また、この事例においても、2012 年 8 月の事例同様に低気圧同士の併合を正確に予測することが、北極低気圧の発達の正確な予測に重要であることが示唆された。

### 【3】 アンサンブル予報準リアルタイム表示 web サイトの管理運営(北極域研究推進プロジェクト ArCS)

世界各国の気象庁で日々行われている時間スケールの異なる 2 つ(2 週間先までと 1・2 ヶ月先まで)のアンサンブル予報を準リアルタイムで表示する web サイト(TIGGE Museum と S2S Museum)の管理・運営をこれまで行ってきた。本年度は主に、S2S Museum への新規予報プロダクトの追加を行った。現時点では、北極/

南極振動、北太平洋振動、太平洋-北米パターンなどのテレコネクションパターンの予測、および、それらの起源となりうる海面水温と海氷密接度(図 2)、赤道域のマッデン・ジュリアン振動、成層圏極域で起こる成層圏突然昇温などの予測が準リアルタイムで閲覧可能である。また、S2S プロジェクトのニュースレター(S2S News Letter)において S2S Museum を紹介し、アウトリーチ活動を行なった。現在、TIGGE

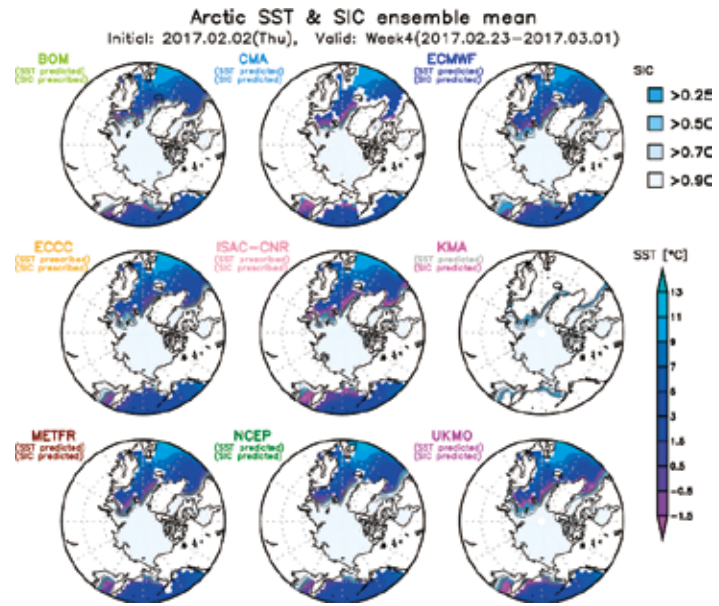


図 2 Museum のプロダクトの一例（海面水温と海氷密接度）

Museum と S2S Museum には世界各国から月 2000 程度のアクセスがある。

#### 【4】 髄膜炎流行予防のための予報プロダクト開発

アフリカ赤道域では、乾季の 6 月頃になると髄膜炎が多く発症するため、髄膜炎ベルトと呼ばれている。髄膜炎の発症地域を事前に予測し、その地域に住む人々にワクチンを投与することで、髄膜炎の発症・拡大を防ぐことができる。ブルキナファッソを対象に、過去の髄膜炎の発症数と気候条件をもとに回帰分析を行った。その結果、気象条件さえ正しく予測されれば、髄膜炎の発症時期を精度良く見積もれることが分かった(投稿論文受理)。今後は予報データを元に、実際の予測に取り組む予定である。

#### 【5】 高解像度気候モデルによる研究

気象庁気象研究所の高解像度気候モデルを用いて、モデルの高度化によるブロッキング現象の再現性の変化、および、ブロッキング現象の将来予測変化の不確実性について調査を行った。前者は、英国・レディング大学などとの国際共同研究のもと複数の高解像度気候モデルを用いて行われた(投稿論文受理)。後者については、将来起こりうる複数の海面水温状態を元に 100 メンバーからなる高解像度気候モデル大アンサンブル予測を行い、従来の研究からは見積もりが難しかったブロッキングの将来変化の不確実性について議論した。

## 【6】 PUFF モデルによる火山灰輸送拡散研究

JST と JICA による SATREPS インドネシア防災プロジェクトに参加し、リアルタイム火山灰追跡 PUFF モデルの開発とインドネシア気象局 (BMKG) への移植を行った。PUFF モデルは空気塊のトラジェクトリーを計算するラグランジュモデルであるが、正確な風の 3 次元データと火山噴火の際の正確な噴出率のデータが重要である。そのため、世界的に最も観測網が充実している桜島火山の地震計や傾斜計のデータから、リアルタイムで分刻みの噴出率を算出する方法を PI の井口（京大）が独自に開発し、それを PUFF モデルに接続し、リアルタイムで火山灰輸送拡散予測を行っている（図 3）。

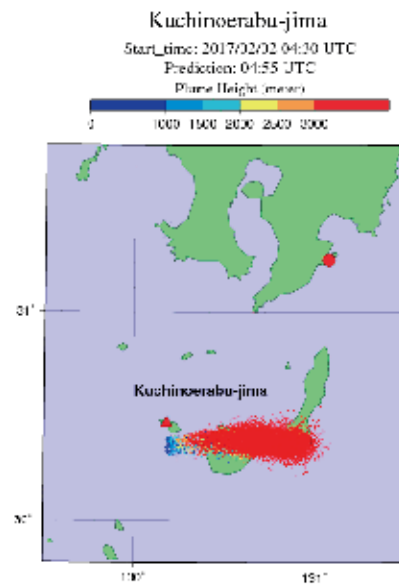


図 3 種子島ロケット発射場周辺の火山灰予測

## 【7】 種子島ロケット発射場周辺の火山灰予測

JAXA の受託研究による種子島と内之浦のロケット発射場周辺の火山灰予測システムの開発を行った。2015 年に発生した口永良部島火山噴火を受けて、ロケット発射時に火山灰が飛来する場合を想定した防災対策システムを構築した。また、内之浦発射場周辺には桜島や霧島の火山があり、同様の防災対策システムをそろえた。さらに、ロケット発射時に燃料から飛散する有害なアルミナの輸送拡散についても、PUFF モデルを改良することで、リアルタイムでアルミナ輸送拡散予測を行うシステムを開発した（図 4）。

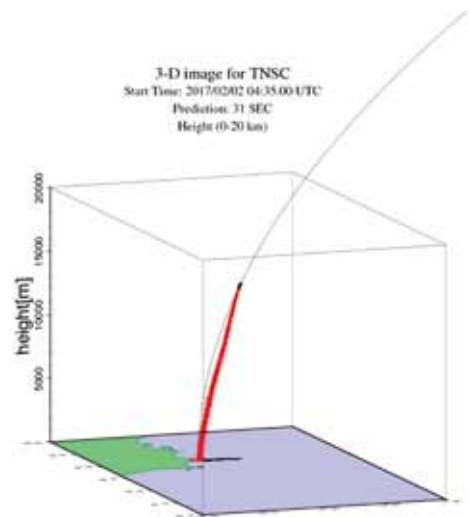


図 4 種子島ロケット発射場周辺のアルミナ予測

## 【8】 アジアのメガシティの気候の将来予測

ベトナムのホーチミンシティを対象として、過去 20 年間および将来 30 年間における最暖月の気温上昇に対するヒートアイランドの影響を、領域気候モデル WRF



を用いて評価した。その結果、過去 20 年間ににおいては、ヒートアイランドの影響（都市化の効果）の方が地球温暖化の影響よりもずっと大きかったが、将来においては全球気候モデルで予測されている温暖化の影響よりもやや小さいという予測結果が得られた（図 5）。先行研究において、日本の東京の場合は、将来においては温暖化の影響の方がはるかに大きいと予測されているが、途上国の発展する大都市であるホーチミンシティの場合は、将来においても都市化の影響を無視することができないと言える。このことは、地域気候の将来予測実験を行う上で、温室効果ガスの排出シナリオを設定するだけでなく、適切な将来都市シナリオも設定しなければならないことを示唆している。

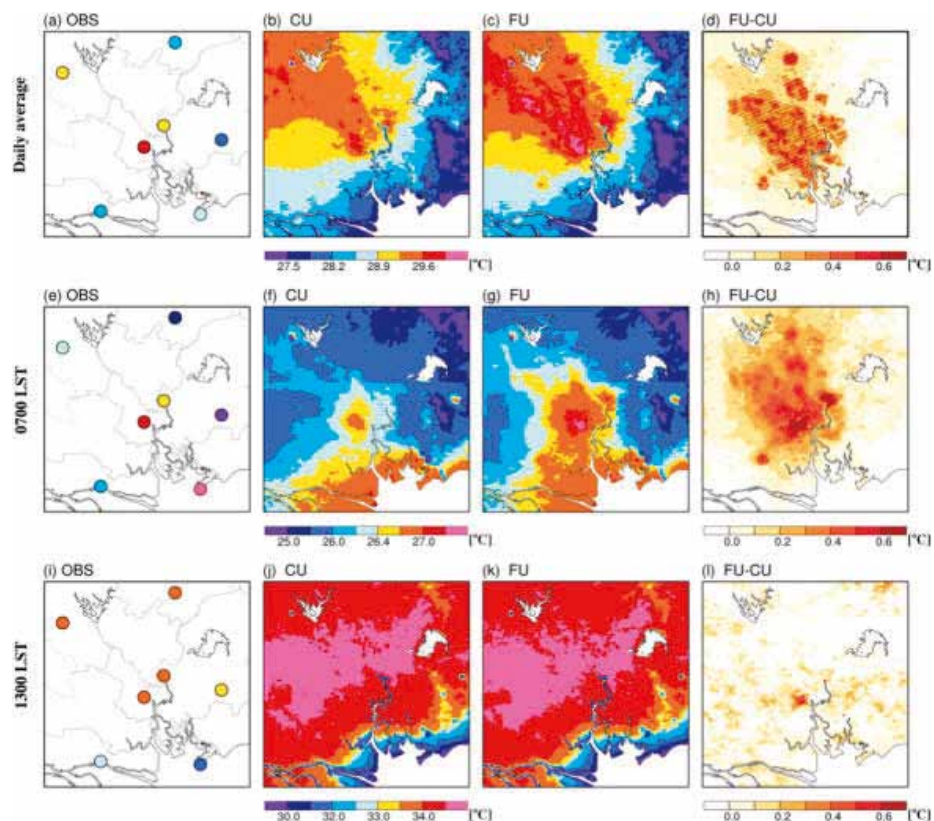


図 5 ホーチミンシティの気温分布. 左から 1 列目が観測値、2 列目が現在気候再現実験の結果、3 列目が将来都市シナリオを使った場合の実験結果、4 列目が将来の都市化による気温上昇量の推定値. 上から 1 行目が日平均気温、2 行目が 7 時の気温、3 行目が 13 時の気温.

## 【9】 日本で発生するフェーンの気候学的研究

過去のフェーンの特徴や理論的な考察から、フェーンを再定義し、フェーン日の抽出手法を高精度化した。さらには、抽出手法の有効性を確認し、抽出したフェーン事例について統計解析を行った。その結果、日本海側は夜間と日中で同程度にフェーンが吹くのに対して、太平洋側では日中に吹きやすいことも分かった。さらには、代表的な稲作地域を対象に、水稻の白穂になりやすさの指標（FTP）を計算した結果、秋田、仙台、新潟、富山、宮崎では、高温日の中で夜間に FTP が 10 以上の日（白穂になりやすい日）の 30～50%以上がフェーンと関係があることが分かった（表 1）。

次に、2016 年 12 月 22 日に糸魚川で発生したフェーンを対象に、気象モデル WRF による予測精度の検証を行った。WRF は、この日の風速を過大評価したが、風向・風速・気温の急激な変化を予測することができた。

表 1 高温で夜間に FTP が非常に高い日とフェーン日の関係

年間	高温日かつ 夜間高FTP日 (2002～2016年)	高温日かつ 夜間高FTP日かつ フェーンだった日 (2002～2016年)	割合 (%)
札幌	92	18	19.6
秋田	163	52	31.9
仙台	88	39	44.3
水戸	92	2	2.2
前橋	417	50	12.0
長野	178	17	9.6
名古屋	365	71	19.5
新潟	207	62	30.0
富山	236	125	53.0
岡山	227	2	0.9
松江	161	34	21.1
福岡	278	57	20.5
宮崎	226	106	46.9

#### 4. 教育

指導学生（田中）

D 3（地球）：相澤、小柴

M 2（地球）：須長、桜井、寺内

M 1（地球）：佐々木、大塚

B 4（地球）：栗花、遠藤、シェン

指導学生（日下）

D 3（地球）：加藤、豊田、西

D 2（地球）：リディア

D 1（地球）：今井

M 2（地球）：畔上、猪狩、清水、矢部

（環境）：沖、相場、中島

M 1（地球）：浅野、小柳、佐藤、中村、木村、松日樂

B 4：根岸、遠藤、山田

他大学等での集中講義等

放送大学放送講師・地球科学客員教授（田中）

国立極地研究所客員教授（田中）

気象大学校 地理学（非常勤講師）

清真学園高等学校・中学校 気候学・気象学（講師）

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 【受賞】

日本気象学会正野賞、松枝未遠、現業アンサンブル予報データを利用した予測可能性  
研究と予測プロダクトの作成、平成 28 年 10 月 27 日

### 【外部資金】

1. 日本学術振興会・学術研究助成基金助成金若手研究(B)、研究代表者：松枝未遠、採択  
年度：2016－2018 年度、平成 28 年度採択金額：1,170,000 円、課題：天候レジーム  
に関連する大気顕著現象の予測可能性
2. 文部科学省・北極域研究推進プロジェクト(ArCS)、代表機関：国立極地研究所、研究  
分担者：松枝未遠、分担、採択年度：2015－2019 年度、平成 28 年度採択金額：  
6,060,000 円、課題：気象・海氷・波浪予測研究と北極航路支援情報の統合
3. JAXA 受託研究、田中博、2016-2017、平成 28 年度採択金額：1,263,000 円、火山灰  
追跡シミュレーションシステムの構築およびロケット噴煙飛散予測に関する研究
4. 電力系統出力変動対応技術研究開発事業（NEDO）、代表機関：東京大学、研究担当  
者：日下博幸、採択年度：平成 26-30 年度、平成 28 年度採択金額：28,038,000 円、  
課題：電力系統出力変動対応技術研究開発事業(風力発電予測・制御高度化)



5. 戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)、代表機関：農業・食品産業技術総合研究機構、研究担当者：日下博幸、採択年度：平成 26-30 年度、平成 28 年度採択金額：2,300,000 円、課題：フェーンの発生実態の解明とリスク情報の創出
6. 気候変動適応技術社会実装プログラム (SI-CAT)、代表機関：国立環境研究所、研究担当者：日下博幸、採択年度：平成 27-31 年度、平成 28 年度採択金額：4,675,000 円、課題：適応策評価のための暑熱環境と健康影響モデル開発
7. 科学研究費助成事業 研究基盤 A、代表機関：帝京大学、研究分担者：日下博幸、採択年度：平成 25-29 年度、平成 28 年度分担金額：200,000 円、課題：東京首都圏における夏季ヒートアイランドと熱的低気圧・局地的豪雨の発生要因解明
8. 共同研究 東芝、研究担当者：日下博幸、平成 28 年度採択金額：1,000,000 円、課題：太陽光発電・気象災害予測のための気象予測技術

【知的財産権】 (種別、氏名、課題名、年月日)

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

Nakazawa, T. and M. Matsueda, 2017: Relationship between Meteorological Variables/Dust and the Number of Meningitis Cases in Burkina Faso. *Meteorol. Appl. Meteorol. Appl.*, doi: 10.1002/met.1640.

Schiemann, R. M. –E. Demory, L. C. Shaffrey, J. Strachan, P. L. Vidale, M. S. Mizieliński, M. J. Roberts, M. Matsueda, M. F. Wehner, and T. Jung, 2017: The resolution sensitivity of Northern Hemisphere Blocking in four 25-km atmospheric global circulation models. *J. Climate*, 30, 337-358. doi: 10.1175/JCLI-D-16-0100.1.

Matsueda, M. and M. Kyouda, 2016: Wintertime East Asian flow patterns and their predictability on medium-range timescales. *SOLA*, 12, 121-126, doi:10.2151/sola.2016-027.

Matsueda, M., A. Weisheimer, and T. N. Palmer, 2016: Calibrating Climate-Change Time-Slice Projections With Estimates of Seasonal Forecast Reliability. *J. Climate*, 29, 3831-3840. doi: 10.1175/JCLI-D-15-0087.1.

Tanaka, H.L., and M. Tamura 2016: Relationship between the Arctic Oscillation and surface air temperature in multi-decadal time-scale. *Polar Science*, doi: 10.1016/j.polar.2016.03.002.

Aizawa, T. and **H.L. Tanaka** 2016: Axisymmetric structure of the long lasting summer Arctic cyclones. *Polar Science*, doi: 10.1016/j.polar.2016.02.002.

木野公朝・下悠子・**田中博**, 2016: AOI 方程式を用いた北極振動の解析的研究. 「天気」, 第 63 号, 2016 年 6 月, 477-486.

**Tanaka, H.L.**, and M. Iguchi 2016: Numerical Simulation of Volcanic Ash Plume Dispersal from Kuchinoerabujima. *J. Natural Disaster Sci.*, 37, 2,79-90.

Hayasaka, H., **H.L. Tanaka**, and P. Bieniek 2016: Sever fire under high pressure condition in Alaska. *Polar Science*, 10, 3, 217-226.

**Tanaka, H.L.**, M. Iguchi, and S. Nakada 2016: Numerical simulations of volcanic ash plume dispersal from Kelud volcano in Indonesia on 13 February 2014. *J. Disaster Res.* 11, 1, 31-42.

Zagar, N., J. Boyd, A. Kasahara, E. Kallen, **H.L. Tanaka**, and J. Yano 2016: Normal modes of atmospheric variability in observation, numerical weather prediction and climate models. *BAMS*, DOI: <http://dx.doi.org/10.1175/BAMS-D-15-00325.1>.

**Kusaka, H.**, A. Suzuki-Parker, T. Aoyagi, S. A. Adachi, Y. Yamagata, 2016: Assessment of RCM and urban scenarios uncertainties in the climate projections for August in the 2050s in Tokyo, *Climatic Change*, 137 (3), DOI 10.1007/s10584-016-1693-2, 427-438, 2016/05/23(謝辞: S-5-3, RECCA, 創生, CCS).

**Doan, Q., H. Kusaka** and Q.B. Ho, 2016: Impact of future urbanization on temperature and thermal comfort index in a developing tropical city: Ho Chi Minh City, *Urban Climate*, 17, 20-31, DOI: 10.1016/j.uclim.2016.04.003, 2016/06/08(謝辞: CCS).

**Doan, Q.V., and H. Kusaka**, 2016: Numerical study on regional climate change due to the rapid urbanization of greater Ho Chi Minh City's metropolitan area over the past 20 years, *International Journal of Climatology*, 36(10), 3633-3650, DOI: 10.1002/joc.4582, 2016/08/01(謝辞: CCS).

## B) 査読無し論文

田中博, 2016: 自然変動と地球温暖化: 地球温暖化に含まれる数十年規模変動. 「てんきすと」, 第 100 号, 2016 年 5 月, 13-17.

田中博, 2016: エルニーニョと北極振動, 日本気象学会 2016 夏季大学講演要旨, 2016 年 7 月 31 日.

田中博, 2016: 風穴循環のメカニズム 第 3 回全国風穴サミット信州植田記念誌, 2016 年 8 月 27 日.

日下博幸, 高根雄也, 2017: 局地気象学分野における数値シミュレーション: 地形と土地利用の影響調査. ながれ, 36(1), 9-17. 2017/02/01(謝辞: SIP).

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

**Tanaka, H.L.** 2017: Development of Volcanic Ash Plume Tracking Model PUFF and Estimation of the Airborne Ash Density. JpGU-AGU Joint Conference.

**H. Kusaka**, Doan, Q., 2016: Urban Climate Projection in 2050s for Greater Ho Chi Minh City Metropolitan Area. International Conference on Vietnam Studies, Hanoi, Vietnam. 2016/12/15 (謝辞: SI-CAT) .

### B) 一般講演

**Yamagami, A.**, **M. Matsueda**, and **H. L. Tanaka**, 2017: Medium-range Predictability of an Extreme Arctic Cyclone in August 2016. Polar Prediction Workshop 2017. 27th – 29th March 2017, Bremerhaven, Germany.

Nakazawa, T. and **M. Matsueda**, 2016: Update: Toward the Better Health Forecasting on Meningitis in the West Africa. Korean Meteorological Society Spring Meeting. 27th – 28th April 2016, Pusan, Republic of Korea.

**Yamagami, A.** and **M. Matsueda**, 2017: Predictability of the Arctic Cyclone in August 2012 in Medium-range Ensemble Forecasts. The 32nd International Symposium on Okhotsk Sea & Polar Oceans 2017. 19th – 22nd February 2017, Monbetsu, Japan.

**Matsueda, M.**, 2016: Predictability of wintertime Pacific weather regimes on medium-range timescales. American Geophysical Union Fall Meeting. 12 – 16 December 2016, San Francisco, USA.

**Matsueda, M.**, T. N. Palmer, and A. Weisheimer, 2016: Calibrating Climate-Change Time-Slice Projections With Estimates of Seasonal Forecast Reliability. 2nd National Climate Dynamics Workshop. 11th – 12th July 2016, Reading, UK.

**Matsueda, M.**, 2016: How well do medium-range ensemble forecasts simulate atmospheric blocking events? High Impact Weather and Climate Conference. 6th – 8th July 2016, Manchester, UK.

Nakazawa, T. and **M. Matsueda**, 2016: MJO in the S2S Database. 11th – 13th April 2016, Singapore.

Matsueda, M., 2016: How well do medium-range ensemble forecasts simulate atmospheric blocking events? Workshop on Atmospheric Blocking. 6th – 8th April 2016, Reading, UK.

Yamagami, A. and M. Matsueda, 2016: Predictability of the Arctic Cyclone in August 2012 in Medium-range Ensemble Forecasts. The Seventh Symposium on Polar Science. 29th November – 2nd December 2016, Tokyo, Japan.

Tadano H., R. Ikeda, H. Kusaka, 2016: Speeding up Large Eddy Simulation by Multigrid preconditioned Krylov subspace methods with mixed precision. The 35th JSST Annual Conference International Conference on Simulation Technology (JSST2016), 27th October, 2016, Kyoto, Japan.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

松枝未遠, 2016: アンサンブルの森に誘われて. 日本気象学会正野賞受賞記念講演. 日本気象学会(秋季). 2016 年 10 月 26 - 28 日, 名古屋.

#### B) その他の発表

宇野史睦, 大竹秀明, 松枝未遠, 山田芳則, 2017: 複数予報機関のアンサンブル予測を用いた日射量予測大外しの予見可能性. 日本電気学会全国大会, 2017 年 3 月 15 - 17 日, 富山.

松枝未遠, 経田正幸, 2016: 冬季東アジア域における大循環場の予測可能性. 東アジア域における大気循環の季節内変動に関する研究集会. 2016 年 11 月 8 - 9 日, 黄檗, 宇治.

山上晃央, 松枝未遠, 2016: 2012 年 8 月に発生した北極低気圧の予測可能性について - 最低中心気圧の予測 -. 日本気象学会 2016 年度秋季大会, 2016 年 10 月 26 - 28 日, 名古屋.

日下博幸, David Whiteman, Adil Rasheed, 木村富士男, 2016: Studies on Local Weather and Climate by the Kusaka Group. Tsukuba Global Science Week (TGSW), 2016/9/21

高根雄也, 近藤 裕昭, 日下 博幸, 片木 仁, 永淵 修, 兼保 直樹, 宮上佳弘 2016: 岐阜県多治見市に高温をもたらす地表面加熱を伴うフェーン, 2016 年日本地理学会秋季学術大会, 仙台, 2016/10/01

鈴木パーカー明日香, 日下 博幸, 2016: 地球温暖化と都市化～気候モデルシミュレーションからの観点～, 2016 年日本地理学会秋季学術大会, 仙台, 2016/10/01

日下 博幸, 中野 美紀, 2017: 暑熱影響評価のための温暖化ダウンスケーラの開発,  
2017 年日本地理学会春季学術大会, つくば, 2017/03/29 (謝辞 : SI-CAT) .

**(4) 著書、解説記事等**

Matsueda, M., 2016: The S2S Museum. S2S News Letter No.4, 3-4.

日下博幸, 2016: 「見えない大気を見る」. くもん出版, 本の総ページ数 159pp.,  
2016/11/29

帝国書院編集部, 2017: 「高等学校新地理 A 指導資料」 帝国書院, 本の総ページ  
数 111pp., 2017/03/20 (気候のページを執筆)

**7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等**

アラスカ大学フェアバンクス校、国際北極圏研究センター(IARC)との大学間協定 (田中)  
インドネシア気候・気象・地球物理庁との共同研究、SATREPS 火山灰追跡モデル (田  
中)

ハノイ自然科学大学訪問、ハノイ工科大学訪問、ハノイ科学・技術大学訪問、JICA ハノ  
イ事務所訪問

**8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績**

三菱総合研究所主催 地球温暖化への適応に向けて都市生活分野 (ヒートアイランド・  
暑熱) 講演

WRF 講習会開催

JICA スリランカ国別研修 (象予報研修) 開催

**9. 管理・運営**

学生生活支援室長・T-ACT 推進室長、副学長補佐、教育研究評議員 (田中)

生命環境科学研究科 地球環境科学専攻 就職支援担当 (日下)

**10. 社会貢献・国際貢献**

日本地球惑星科学連合フェロー審査員会 (田中)

日本ヒートアイランド学会 (理事、日下)

気候利用・影響研究 研究会 (幹事、日下)

日本地理学会 (地理学評論 (欧文誌) 編集委員、日下)

日本気象学会 (講演企画委員、日下)

熱中症予防声かけプロジェクト（実行委員、日下）

NEDO 発電量予測技術委員会 / 発電量予測技術研究会（委員、日下）

第 24 回風工学シンポジウム（査読委員、日下）

気象庁 気候問題懇談会 検討部会（委員、日下）

日本学術会議 自然地理学環境防災小委員会（委員、日下）

気象庁 地球環境・海洋部 気候問題懇談会検討部会（委員、日下）

平成 28 年度気候変動適応情報プラットフォーム構築ワーキンググループ（委員、日下）

## 11. その他

オクスフォード大学物理学部滞在(松枝未遠、国際テニユアトラック制度)

アンサンブル予報準リアルタイム表示 web サイト (TIGGE Museum: <http://gpvjma.ccs.hpcc.jp/TIGGE/>, S2S Museum: <http://gpvjma.ccs.hpcc.jp/S2S/>) の管理・運営(松枝、山上)

## VII. 高性能計算システム研究部門

### 1. メンバー

教授	朴 泰祐
教授	高橋 大介
教授	建部 修見
准教授	川島 英之
助教	多田野 寛人
助教	小林 諒平
研究員	田中 昌宏
研究員	Mohamed Amin Jabri
研究員	藤田 典久
学生	大学院生 15 名、学類生 7 名

### 2. 概要

本研究部門では、高性能計算システムアーキテクチャ、並列プログラミング環境、GPU 利用技術、並列数値処理の高速化研究、分散システムソフトウェア、エクストリームビッグデータの基盤技術等の研究を行っている。

### 3. 研究成果

#### 【1】 TCA における CG 法計算に関する性能評価 [朴]

TCA (Tightly Coupled Accelerators)コンセプトに基づく FPGA (Field Programmable Gate Array)実装ハードウェアである PEACH2 の通信ドライバ及び制御方式について改良し、NAS Parallel Benchmarks の CG ベンチマークを GPU クラスの HA-PACS/TCA 上で 2 次元プロセスマッピング実装し、短メッセージ通信に強いという TCA の特性を生かし H27 年度の結果よりさらに性能を向上させた。

図 1 に NAS-PB CG の TCA 及び InfiniBand による実行性能の比較を、計算時間及び通信時間の内訳によって示す(Class=A)。16 ノード実行において、TCA による通信時間が InfiniBand を下回り、通信時間比較では 1.44 倍の性能向上が得られていることがわかる。2 次元分割法を有効に利用することにより、計算時間が短縮され、同時にメッセージ長も短くなるが、短メッセージに強いという TCA の長所が現れ、ストロングスケーリングにおいて InfiniBand を上回る性能が得られた。

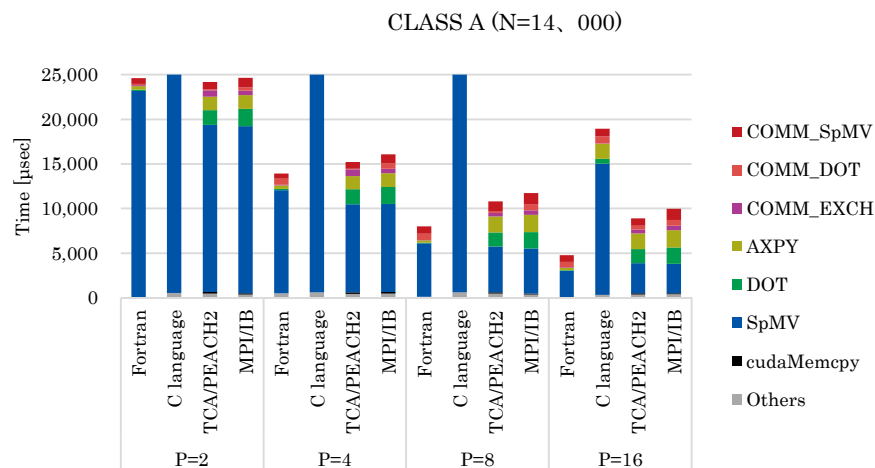


図 1 NASPB-CG の2次元マッピング実装における TCA/PEACH2 と InfiniBand による実装の性能評価

## 【2】 PGAS 言語向け通信ライブラリ GASNet の GPU 向け実装と TCA 実装【朴】

GASNet は米国 LBNL (Lawrence Berkeley National Laboratory)で開発された、PGAS (Partitioned Global Address Space)モデル実装用の低レベル通信ライブラリである。分散メモリ上で MPI よりも軽い通信を実現する。これまで GASNet は CPU における並列通信のみを対象にしてきたが、近年、これを GPU を持つクラスタノードに対応させる拡張が LBNL によって進められている。H27 年度に引き続き、LBNL の GASNet/GPU 開発チームと共同研究を行い、先方が InfiniBand を対象として進めているリファレンス実装と並行し、これを TCA 機構にも使い、両者の性能比較を行う研究を進め、国際会議共著論文及び国内会議共著論文の執筆を行った。TCA 機構の問題点の一つはプログラミング互換性であり、本来は TCA 専用の API を用いたアプリケーションあるいはライブラリの記述が必要であるが、本実装を用いることにより、GASNet/GPU の API で記述された処理系は原理的に TCA 上で実行できることになる。

TCA 上の GASNet/GPU (以下、GASNet/TCA) の設計・実装は、GPU からの通信要求を、CPU 上で実行されている通信デーモンで監視し、そこから発生する必要な通信を TCA の API を用いて発行することで、間接的に GPU からの TCA 要求を処理する。通信結果を返す必要がある場合は、同様の機構を用いて GPU に送る。これらは CUDA で提供されるピンダウンメモリ領域を使ったリングバッファを介して行われるが、通信データは TCA が提供する GPU 間リモート DMA を用いて送受信されるため、リングバッファが性能ボトルネックとなることはない。図 2 にリングバッファの基本構造を、図 3 に通信性能を最適化するために導入される4つの通信モードの様子を示す。現在の GASNet/GPU はリモート通信の対象(ローカル通信エリアではなく)となる segment を1つだけ許している。これらの4つのモードは、この制約を意識し、ユーザの要求に応じて最小限のバッファリングで通信が完了するように工夫されている。



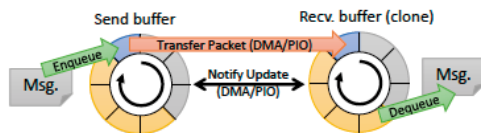


図 2 GASNet/TCA における GPU・CPU 間通信のためのパケット通信機構

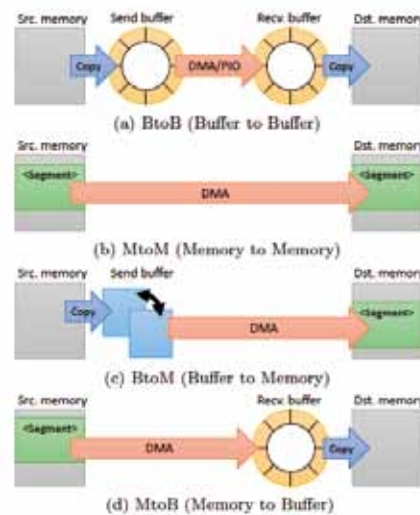


図 3 GASNet/TCA における 4 つの通信モード

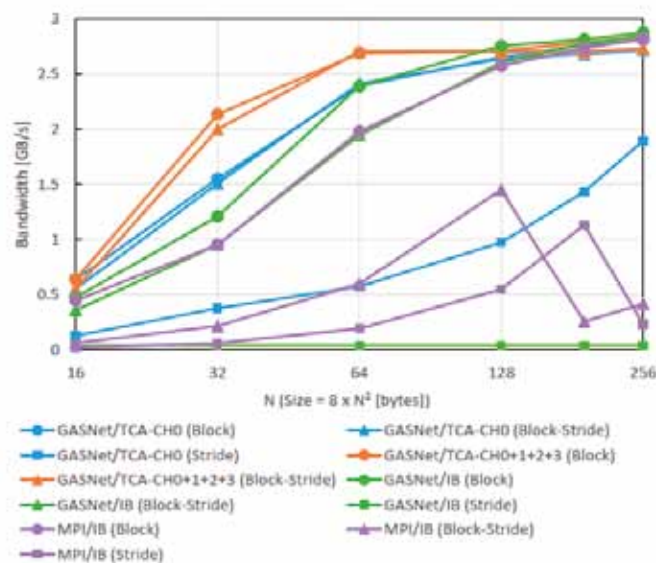


図 4 GASNet/GPU における 3 次元矩形領域の halo データ交換性能の比較

CCS における GPU クラスタ HA-PACS/TCA を使い、特に TCA が注目している多次元矩形領域における halo (隣接ノードとの接合面) データ交換について評価を行った結果を図 4 に示す。ここでは GASNet/GPU の API に基づき、3 次元矩形領域の halo データ交換を 1 次元方向 (連続領域通信)、2 次元方向 (ブロックストライド通信)、3 次元方向 (ストライド通信) の 3 種類の方向で通信した場合の性能を、MPI/InfiniBand と TCA の両者について比較している。図からわかるように、TCA では連続領域通信とブロックストライド通信でほとんど性能が変わらないのに対し、ブロックストライド通信をパッキングによってのみ処理可能な MPI/InfiniBand では後者の場合に大きく性能が

低下していることがわかる。また、このモードでの通信に関しては、GASNet ではなく通常の MPI/InfiniBand を用いた場合よりも TCA がさらに良い性能を示している点も重要である。しかし、単純なストライド転送(3次元 halo)については、TCA であってもパッキングを用いないと性能が低下するため、そのオーバーヘッドの度合いは MPI/InfiniBand とほとんど同じである。ハードウェア性能の違いより、単純な連続通信あるいはパッキング通信では MPI/InfiniBand の方が性能が若干高いが、一般的な多次元 halo 通信において、TCA が常に高性能を示すことが確認された。

なお、本研究の国内発表である HPCS2016 における発表は、同会議の最優秀論文賞を受賞し、本研究の意義が広く認められると共に、本 CREST 研究をベースとした米国 LBNL との共同研究が共著論文による共同受賞という重要な成果を挙げた点で重要である。

### 【3】 GPU 直接起動型 MPI ライブラリ GMPI の開発 [朴]

H27 年度に引き続き、GPU カーネルから直接 MPI 通信を起動するためのフレームワークである GMPI (GPU-ready MPI)の開発を行った。前年度の予備評価では、単純な pingpong 転送においては GMPI における GPU 間通信時間は、従来手法である GPU カーネルからの離脱と CPU での MPI 通信起動及び GPU カーネルの再呼び出しの合計時間を下回り、有効な通信手法であることが確認された。これにより、GPU 化する前の MPI プログラムを容易に並列 GPU 環境に移植することが可能となっていた。しかし、実アプリケーション例として Himeno Benchmark に適用した場合、本来は変化がないはずの GPU 内演算時間に影響が現れ、MPI 実装に比べ演算時間が延びるという現象が観測された。

H28 年度研究ではこの問題に関する改善を試みた。詳細な実行時間解析の結果、以下の現象が生じていることが間接的に認められた。

- MPI と分割カーネルによる実装では、任意個数のスレッドを起動可能で、それらの間ではカーネル関数の呼び出しを基準とした同期が取られるのに対し、GMPI ではカーネル関数から抜け出さずに通信を行うため、スレッド数は GPU 演算コア数を上回ることができない。
- このため問題全体の並列分割数の上限は GPU コア数となり、問題のデータ領域が大きい場合、GPU コアのレジスタ、ローカルメモリ、テキスチャメモリ等のハードウェアリソースの制約に対し問題がフィットせず、レジスタスピル等が頻発し、演算性能が低下する。
- さらにカーネル内でのコア間同期セマンティクスを維持するため、ソフトウェアオーバーヘッドの大きい同期手法を実装しなければならず、そのコストは通信時間とカーネル呼び出し時間コストを上回ってしまう場合がある。

以上の問題点についての解決方法として、通信に関する同期を CPU 側で間接的にとり、コア間同期のコストを下げる手法を検証したが、スレッド数の縮小により GPU コア内のリソースを圧迫する問題については現在の CUDA ベースの枠組み内では十分な最適化が行えないことがわかった。

このため、本手法の適用範囲は制限され、比較的小規模な問題に対しては一定の並列性を持つ環境で性能を向上させることはできるが、より大きな問題に対してはコンパイラを含めた抜本的な最適化が必要であることがわかった。

#### 【4】 メニーコアプロセッサ向けアプリケーション性能向上 [朴]

昨年度に継続し、CCS の矢花グループとの共同研究の下、同グループで開発中の物性第一原理計算コード ARTED (Ab initio Real Time Electron Dynamics simulator)のメニーコアプロセッサ向け性能最適化を行った。特に H28 年度後半においては、JCAHPC で導入した国内最大の Xeon Phi クラスタである Oakforest-PACS 向けに同コードを最適化し、これまで COMA 上の KNC (Knights Corner)で進めてきたメニーコアプロセッサ向けの ARTED コードの性能チューニングを、Oakforest-PACS の KNL (Knights Landing)向けに比較的スムーズに移植することに成功した。

まず、年度前半での KNC 向けのチューニングについて述べる。ARTED のカーネル部分は 3 次元の 25 点ステンシル計算であり、メモリインテンシブかつ CPU インテンシブな計算が支配的である。KNC には GDR5 規格の高速メモリが実装されており、これを有効活用することでメモリ性能依存な計算が高速化される。加えて、KNC の特徴である AVX512 (512 ビット水平 SIMD ベクトル命令)を最大限に活かすためのデータ配置及び演算順序をコード上で最適化し、1 台の KNC の理論ピーク演算性能である 1TFLOPS の約 25~30%の実効性能を引き出すことに成功した。

```

real(8), intent(in) :: B(0:NLz-1,0:Nly-1,0:Nlx-1)
complex(8),intent(in) :: E(0:NLz-1,0:Nly-1,0:Nlx-1)
complex(8),intent(out) :: F(0:NLz-1,0:Nly-1,0:Nlx-1)

#define IDX(dt) iz,iy,modx(ix+(dt)+NLx)
#define IDY(dt) iz,mody(iy+(dt)+Nly),ix
#define IDZ(dt) modz(iz+(dt)+NLz),iy,ix

do ix=0,NLx-1
do iy=0,Nly-1
!dir$ vector nontemporal(F)
do iz=0,NLz-1
v=0; w=0
! z-computation
v=v+Cz(1)*(E(IDZ(1))+E(IDZ(-1))) ...
w=w+Dz(1)*(E(IDZ(1))-E(IDZ(-1))) ...
! y-computation
! x-computation
F(iz,iy,ix) = B(iz,iy,ix)*E(iz,iy,ix) &
& + A *E(iz,iy,ix) &
& - 0.5d0*v - zI*w
end do
end do
end do

```

図 5 KNC 向けに最適化された3次元 25 点ステンシルコードのカーネル部分

図 5 に 3 次元 25 点ステンシルコードのカーネル部分の KNC 向け最適化結果を示す。ここでは non-temporal store の活用、512bit SIMD 命令の演算数と配置にフィットさせたデータ配列宣言、KNC が苦手とする整数剰余演算を省くためのテーブル置き換え等の最適化を行っている。さらに、大規模並列化のために KNC の native mode を用いた実装と、CPU と KNC を併用する hybrid

mode による実装を行った。native mode 実行は、アクセラレータである KNC 上の Linux で MPI プロセスを直接実行することにより、KNC だけのクラスタを構築し、MPI 通信もその上で直接行う方法である。一方、hybrid mode 実行では、CPU 上の MPI プロセスと native mode 相当の KNC 上の MPI プロセスを一つの MPI 空間で実現し、クラスタ上の全リソースを用いた並列処理を実現する。我々は ARTED コードの hybrid mode 実行コードを実装し、COMA クラスタで性能評価した。

図 6 に COMA のノードを最大 128 台利用した場合の ARTED のストロングスケーリング性能を示す。CPU のみによる実行、KNC の native mode のみによる実行、symmetric mode で CPU と KNC に均等に負荷を割り付けた場合、そして symmetric mode で CPU と KNC の実効性能を考慮し最適負荷分散を行った場合の 4 通りの結果が示されている。全てのノード数において負荷バランスを考慮した symmetric mode 実行が最高性能を達成しているのがわかる。また、ノード数が比較的少ない場合では symmetric mode 実行の性能は CPU のみを用いた場合の 2 倍以上であり、KNC 部分では理論ピーク性能の約 25～30%の性能が達成された。

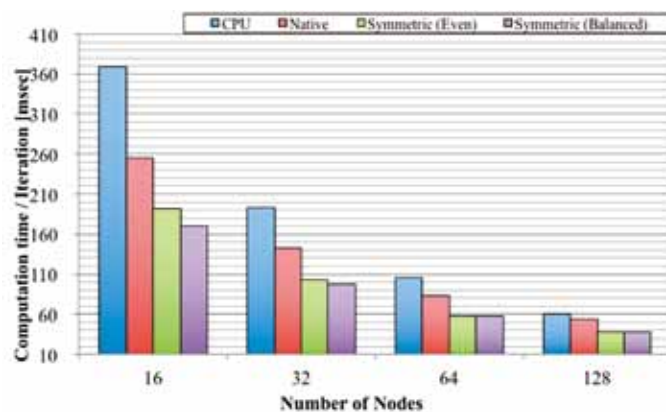


図 6 ARTED コードの各種実行モードにおけるストロングスケーリング評価

一方、これらの結果に基づき、同コードの MPI プロセス内を OpenACC 化する作業を、NVIDIA 社との共同研究により行った。コードは同社の最新 GPU である P100 (Pascal アーキテクチャ)上で実行され、Intel Xeon Phi (KNL: Knights Landing)プロセッサを上回る実効性能が達成された。しかし、P100 の理論ピーク性能は 5.3TFLOPS で、Oakforest-PACS の KNL の 3.0TFLOPS より 1.77 倍高性能であり、実効性能効率の点では KNL 実装の方が効率が高いことがわかった。

また、年度終盤において、JCAHPC が実施する大規模 HPC チャレンジプログラムの機会を用い、Oakforest-PACS の全系 (8192 ノード、約 25PFLOPS) を用いた超大規模の ARTED 実行を行った。このトライアルでは、同システムを 3 日間専有し、通常実行では不可能な超大規模・長時間での実行を行った。ARTED コードの KNL 上の大規模並列性能はカーネルコード部分で約 25%、コード全体では約 17%であった。また、性能評価だけでなくサイエンスとしての光物性シミュレーション結果も得たが、これについては矢花グループの報告に詳しい。

**【5】 PEZY-SC 向け OpenACC コンパイラの予備実装・評価 [朴、佐藤 (CCS フェロー)]**

PEZY-SC プロセッサは ExaScaler 社のスーパーコンピュータシステムで採用されているアクセラレータである。このシステムは電力性能比が高いという特徴から注目を集めているが、PZCL という OpenCL の方言で記述するためプログラミングが煩雑であるという課題がある。そこで、PEZY-SC プロセッサのプログラミングを簡易にし、既存の OpenACC コードをより多くのプラットフォームで実行可能にするため、PEZY-SC 向けの OpenACC コンパイラを予備実装し評価した。

PEZY-SC には 1024 個のコアとキャッシュが階層的に構成されており、各階層において同期を取ることが可能である。各コアでは 8 スレッドが SMT で動作する。8 つのスレッドは実際には 4 つのペアで構成されており、通常はペアの片方だけしか実行されず、同期や明示的なスレッド切り替え命令によってもう片方が実行されるようになる。

コンパイラ実装には Omni OpenACC コンパイラという CUDA にコード変換を行う OpenACC コンパイラを拡張することで、OpenACC コードから PZCL にコード変換を行えるようにした。現在は予備実装段階で PEZY-SC 向けの最適化は実装されていない。

ベンチマークとして N-body と NAS Parallel Benchmarks CG (NPB-CG) の 2 つを用い、比較として PZCL コード 3 種類と OpenACC コードを用意した。評価環境には KEK の Suiren Blue の 1 ノードを使用した。性能を図 7 に示す。PZCL の Opt.1 はプロセッサ全体同期命令を用いて複数のカーネルをまとめることでカーネル起動コストを減らす最適化である。Opt.2 は明示的なスレッド切り替えによりメモリアクセスレイテンシの隠蔽やキャッシュの有効利用をする最適化である。

N-body では OpenACC は PZCL の 98%以上の性能が出ており、また PZCL での最適化の効果も小さかった。これは N-body は計算律速のプログラムであったからである。次に NPB-CG では OpenACC は PZCL (base)の 92%以上の性能を達成できた。性能低下の要因としてはコンパイラによるコード変換やリダクション変数に関わる余計な通信があげられる。また OpenACC は PZCL(Opt.1)と比較すると 69~99%、PZCL(Opt.1、2)と比較すると 62~88%の性能であった。Opt.1は問題サイズが小さく実行時間が短い時に効果が大きく、また Opt.2はどの問題サイズでも効果があった。コードの行数を比較すると、OpenACC は PZCL に比べて N-body は 48%、NPB-CG は 45%の行数で記述できており、OpenACC により簡易に記述ができたと言える。

OpenACC コンパイラにおいても PEZY-SC 向けに最適化したコード変換を行えるようにする必要がある。Opt.1 に関しては OpenACC kernels 指示文で指定された部分を 1 カーネルにまとめることは可能である。また Opt.2 に関しては対応する指示文を新たに導入することを検討している。また OpenACC は 1 ノード上のアクセラレータの処理しか記述できないため MPI など通信を記述する必要がある。そこで XcalableACC を用いて PEZY-SC のクラスタにおいても、簡易な記述を可能にすることを計画している。

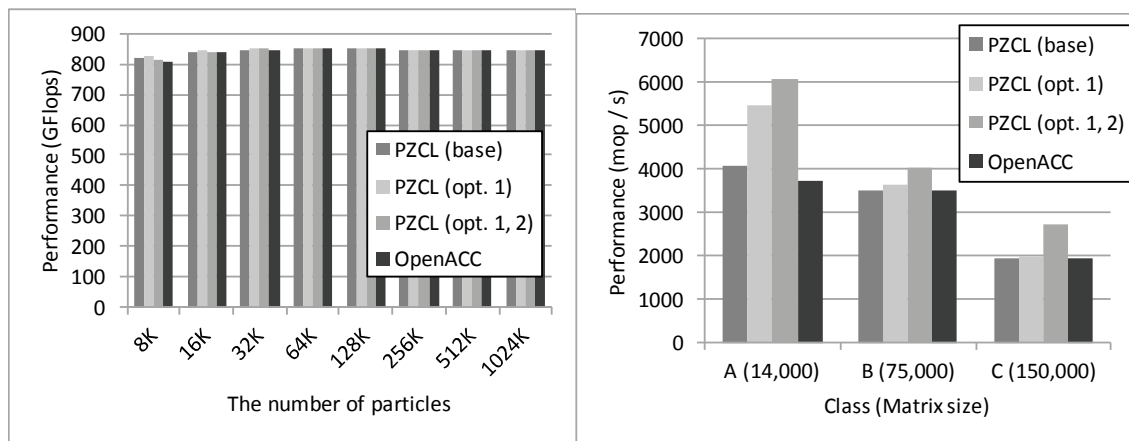


図 7: PZCL と OpenACC による N-body の性能 (左) と NPB-CG の性能 (右)

### 【6】 XcalableACC における片側通信の改善 [朴、佐藤 (CCS フェロー) ]

XACC では XMP と同様に local-view モデルにおける coarray を用いた通信が可能である。NPB-CG における評価では global-view モデルよりも高い性能を達成し、MPI+OpenACC と同等の性能が得られたが、姫野ベンチマークでは global-view よりも性能が下がる問題があるためその改善を行った。

図 8 に姫野ベンチマークの性能を示す。評価環境には CCS の HA-PACS/TCA システムを用いた。XACC local-view (XACC-L) は 4×2 プロセス以上で性能が下がっており MPI+OpenACC で send/recv を使ったものと比べて 85% まで性能が低下していた。原因は coarray の通信がブロッキングになっており、複数の通信が同時に行われなかったためであった。現在の実装では coarray を単純に関数呼び出しに置き換えるだけのため、依存の有無にかかわらず通信がブロッキングとなっている。姫野ベンチマークでは 2 つの隣接ノードと同時に通信可能であるが、それが同時に通信できずに性能が低下した。

実験的に通信をノンブロッキングにしてみると (XACC-L(nb))、8×4 プロセスまで MPI+OpenACC の 98% 以上と同等の性能まで改善した。また 8×8 プロセスにおいても、MPI+OpenACC で get を用いたものと同等の性能となっているため、この差は send/recv と get 通信自体の性能差によるものと言える。今後は通信をノンブロッキングにするためのコンパイラの改善およびユーザが指定するための指示文を提案し実装する。また現在は XACC/C のみで利用可能なので Fortran でも利用可能にする。



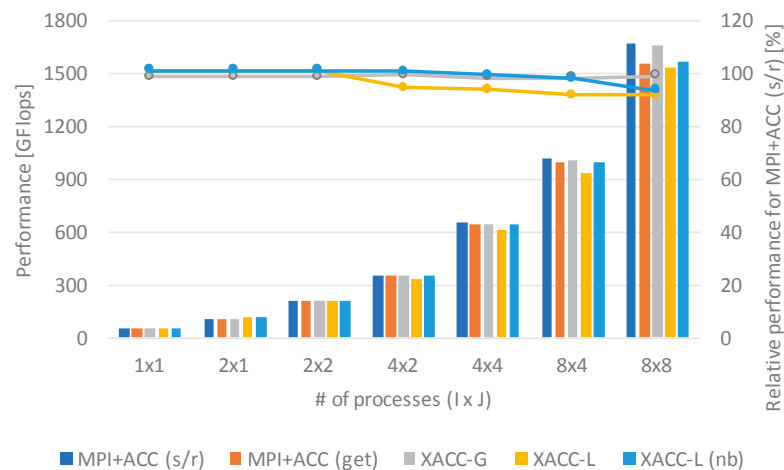


図 8: 姫野ベンチマークの性能

### 【7】FPGA 上の高位合成による HPC アプリケーションの実装 (朴、小林)

JST-CREST における TCA コンセプトを発展させ、FPGA により積極的にアプリケーションの一部をオフロードすると共に、引き続きネットワークインタフェース機能や GPU との連携機能を盛り込んだ新しいコンセプト AiS (Accelerator in Switch)の基盤研究として、FPGA 上での高レベル言語 OpenCL によるアプリケーション記述と、低レベル機能の Verilog HDL 記述を並行して行い、両者を融合した新しい FPGA プログラミングのフレームワークを構築する研究を進めている。

H28 年度研究では、Xilinx 社及び Altera 社における最新鋭 FPGA である Arria10 及び UltraScale を用い、HPC アプリケーションを想定したカーネルループを OpenCL で記述し、その一方で FPGA 評価ボード上の特定のハードウェア機能を Verilog HDL で記述、最終的に後者をサブルーチン的に前者から呼び出すことができることを確認し、今後の研究の基礎となる技術を確立した。具体的には、FPGA ボード上の固有ハードウェアである LED 群を操作するルーチンを Verilog HDL で実装し、OpenCL 側から呼び出す実験を行った。また、OpenCL 側については標準的なメモリベンチマークである Stream Benchmark の各カーネルループを実装し、OpenCL だけでは dual channel memory の操作が行えないことを確認した上、これを Verilog HDL で記述すればメモリバンド幅を有効活用できることを確認した。

これらはまだ基礎実験の範疇を出ないが、今後、OpenCL 高位合成と Verilog HDL による低レベル記述を組み合わせ、ユーザは OpenCL だけを記述してシステムの低レベルハードウェアを自由にアクセスすることができるようにし、これによって AiS のコンセプトを具体化するフレームワークを構築していく予定である。このコンセプトにより、CCS における PACS-X 計画を支える基盤技術が構築できると考えている。

## 【8】Xeon Phi クラスタ上の並列高速フーリエ変換 (FFT) における通信隠蔽の自動チューニング (高橋)

高速 Fourier 変換 (fast Fourier transform、以下 FFT) は、科学技術計算において今日広く用いられているアルゴリズムである。並列スーパーコンピュータの普及に伴い、並列 FFT アルゴリズムがさまざまな研究者によって提案されており、ライブラリとなっているものも多い。分散メモリ型並列計算機においてチューニングを行う際に、最適な性能パラメータはプロセッサのアーキテクチャ、ノード間を結合するネットワーク、そして問題サイズなどに依存するため、これらのパラメータをその都度手動でチューニングすることは困難になりつつある。そこで、自動チューニングを適用した FFT ライブラリとして FFTW や、SPIRAL などが提案されている。また、並列 FFT における演算と通信のオーバーラップ手法が提案されている。本研究では、並列一次元 FFT において通信隠蔽のパラメータを自動チューニングし Xeon Phi クラスタ上で性能評価を行った。

今回実現した並列一次元 FFT は six-step FFT と呼ばれるアルゴリズムに基づいている。分散メモリ型並列計算機において six-step FFT を実現する際には、入力と出力をブロック分割にした場合、全対全通信が 3 回行われることから、計算時間の大部分が全対全通信によって占められることになる。演算と通信をオーバーラップする手法としては、MPI の非同期通信を用いる方法が広く用いられているが、OpenMP を用いた通信用スレッドを導入する手法が Idomura らによって提案されている。この手法を応用することで、演算と通信を分割しパイプライン方式でオーバーラップさせることが可能である。

分散メモリ型並列計算機において並列一次元 FFT を自動チューニングする際には、全体に関わる性能パラメータとして主に以下の 4 つが存在する。

- (1) 全対全通信方式
- (2) 通信メッセージサイズの分割数
- (3) 基底
- (4) ブロックサイズ

これらの性能パラメータを探索することで、並列一次元 FFT の性能をさらに向上させることが可能である。なお、(1)~(2)は MPI プロセス間通信に関するパラメータであり、(3)~(4)は各 MPI プロセス内の性能に関するパラメータである。今回は(2)~(4)に対して自動チューニングを適用した。

演算と通信を分割しパイプライン方式でオーバーラップさせる場合、通信メッセージサイズの分割数 (パイプラインの段数) を大きくすれば、オーバーラップの割合が高くなる。その一方で、通信メッセージサイズの分割数を大きくすれば、通信 1 回あたりの通信メッセージサイズが小さくなるため、通信バンド幅も小さくなる。また、演算と通信をオーバーラップさせる際には、通信によってメモリバンド幅が消費される。したがって通信メッセージサ



イズの分割数には最適な値が存在すると考えられる。そこで、通信メッセージサイズの分割数を  $NDIV$  としたとき、 $NDIV=1$ （オーバーラップなし）～16 の範囲で、通信すべき要素数が  $NDIV$  で割り切れるすべての場合について全探索を行う。

six-step FFT アルゴリズムでは、データ数  $N$  を  $N = N_1 \times N_2$  と分解して  $N_1$  組の  $N_2$  点 FFT と、 $N_2$  組の  $N_1$  点 FFT をそれぞれ計算する。ここで、 $N_1$  と  $N_2$  を基底と呼ぶことにする。 $N_1$  と  $N_2$  の値は、 $N = N_1 \times N_2$  を満たしていれば任意に選ぶことができる。ただし、MPI プロセス数を  $P$  とした場合、 $N_1, N_2 \geq P$  を満たす必要がある。通常は  $N_1 \approx N_2 \approx \sqrt{N}$  となるように  $N_1$  と  $N_2$  を選ぶことが多いが、性能が最も高くなるように  $N_1$  と  $N_2$  を選ぶことができる。なお、データ数  $N$  が 2 のべき乗になる場合には、すべての  $N_1$  と  $N_2$  の組み合わせを試行したとしても、探索空間は  $\log_2(\sqrt{N}/P)$  となる。

six-step FFT アルゴリズムにおいては行列の転置が必要になるが、この行列の転置はキャッシュブロッキングを行うことで効率よく実行できることが知られている。その際、最適なブロックサイズ  $NB$  は、問題サイズおよびキャッシュサイズ等に依存する。今回の実装では、ブロックサイズ  $NB$  を 2 のべき乗に限定して 4、8、16、32、64 と変化させている。

性能評価にあたっては、並列 FFT ライブラリである FFTE 6.2alpha と、自動チューニング手法を FFTE 6.2alpha に適用したもの、そして FFTW 3.3.6-pl1 との性能比較を行った。 $N = 2^m$  の  $m$  を変化させて順方向 FFT を連続 10 回実行し、その平均の経過時間を測定した。なお、FFT の計算は倍精度複素数で行っている。

Xeon Phi クラスタとして、最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC) に設置されている Oakforest-PACS (8208 ノード) の 128 ノードを用いた。コンパイルオプションは FFTE に対しては “mpiiFORT -O3 -xMIC-AVX512 -qopenmp” を、FFTW に対しては “mpiicc -O3 -xMIC-AVX512 -qopenmp” を用いた。各ノードあたりのスレッド数は 64、MPI プロセス数は 1 に設定している。 $N = 2^m$  点 FFT の GFlops 値は  $5N \log_2 N$  より算出している。図 9 に並列次元 FFT の性能を示す。図 9 から、 $N \geq 2^{30}$  の場合には通信隠蔽の効果により FFTE 6.2alpha (no overlap) や FFTW 3.3.6-pl1 よりも FFTE 6.2alpha with AT の性能が高くなっていることが分かる。また、FFTE 6.2alpha ( $NDIV=4$ ) では通信メッセージサイズが常に 4 分割されており全対全通信性能が低くなっていることから、 $N \leq 2^{29}$  の場合には FFTE 6.2alpha (no overlap) よりも性能が低くなっていることが分かる。

図 10 に全対全通信の性能を示す。通信メッセージサイズが 512KB となる場合には、通信バンド幅が 2GB/s を超えていることが分かる。一方で、通信メッセージサイズが 256KB から 128KB に減少する際には通信バンド幅が約 1/7 になっている。このような場合には通信メッセージサイズを 2 分割すると通信時間が約 7 倍になってしまうことを意味している。表 1 に並列次元 FFT における自動チューニングの結果を示す。FFTE 6.2alpha では  $N_1 = N_2 = \sqrt{N}$  または  $N_1 = \sqrt{N/2}$ 、 $N_2 = 2N_1$  となるように  $N_1$  と  $N_2$  が選ばれており、ブロックサイズとして

NB = 32 が用いられているが、これらのパラメータは必ずしも最適ではないことが自動チューニングの結果から分かる。特に、 $N \leq 2^{25}$  においては NDIV=1、つまり演算と通信をオーバーラップさせない場合が最も高速であることが分かる。

並列一次元 FFT において、通信隠蔽のパラメータについて自動チューニングを行うことで、性能をさらに向上させることができることを示した。

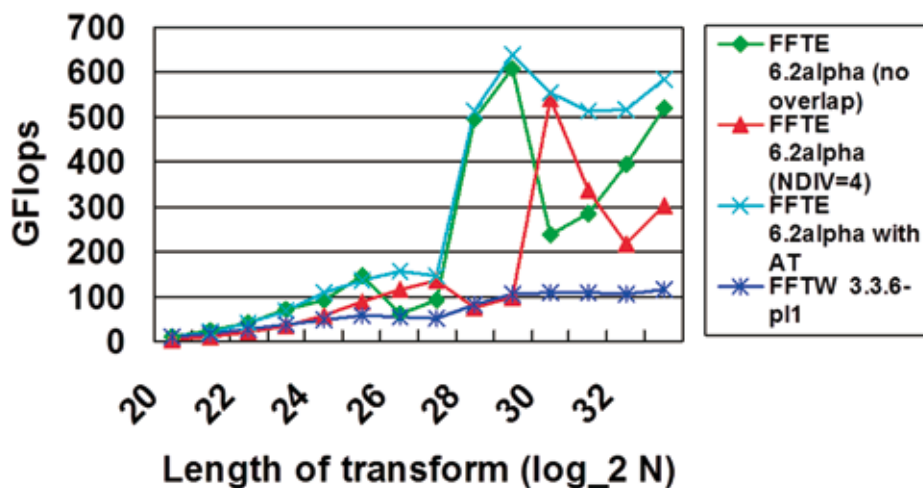


図 9: 並列一次元 FFT の性能 (Oakforest-PACS、128 ノード)

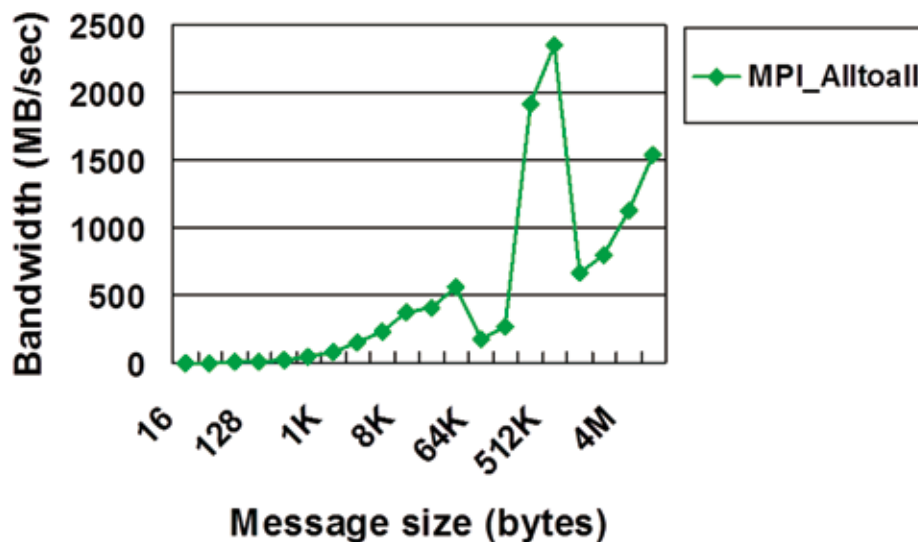


図 10: 全対全通信の性能 (Oakforest-PACS、128 ノード)

表 1: 並列一次元 FFT における自動チューニングの結果 (Oakforest-PACS、128 ノード)

$N$	FFTE 6. 2alpha					FFTE 6. 2alpha with AT				
	$N_1$	$N_2$	NB	NDIV	GFlops	$N_1$	$N_2$	NB	NDIV	GFlops
$2^{24}$	4096	4096	32	4	57.789	4096	4096	32	1	109.426
$2^{25}$	4096	8192	32	4	86.856	4096	8192	16	1	137.380
$2^{26}$	8192	8192	32	4	116.943	8192	8192	16	2	154.771
$2^{27}$	8192	16384	32	4	136.976	8192	16384	32	4	147.322
$2^{28}$	16384	16384	32	4	73.285	8192	32768	16	1	513.787
$2^{29}$	16384	32768	32	4	98.635	16384	32768	8	1	638.425
$2^{30}$	32768	32768	32	4	541.741	32768	32768	64	4	554.879
$2^{31}$	32768	65536	32	4	337.246	32768	65536	32	8	512.600
$2^{32}$	65536	65536	32	4	217.038	65536	65536	32	16	516.490
$2^{33}$	65536	131072	32	4	303.718	32768	262144	16	1	584.730

### 【9】Xeon Phi における多倍長精度浮動小数点演算の実現と評価（高橋）

多倍長精度浮動小数点演算を高速に行うために、これまでさまざまなライブラリが提案されている。また、GPU における多倍長精度浮動小数点演算の実装が行われている。

一方で、メニーコアプロセッサとして Xeon Phi の普及が進んでいる。Xeon Phi においてこれまでに多倍長精度整数演算を実装した例が知られているが、Xeon Phi における多倍長精度浮動小数点演算はまだ実装されていないのが現状である。そこで本研究では、Xeon Phi において多倍長精度浮動小数点演算を並列化し性能評価を行った。

多倍長精度浮動小数点数は、32 ビット整数の配列を用いて符号部、指数部、および仮数部で表現されている。1 番目の要素には符号  $s$  (1 または  $-1$ ) が格納されており、2 番目の要素には指数部  $q$  ( $-2^{31} \leq q \leq 2^{31} - 1$ ) が格納されている。3 番目から  $m + 2$  番目までの要素には仮数部  $c$  がビッグエンディアンで 10 進 8 桁ずつ格納されている。このような表現形式により、多倍長精度浮動小数点数の値は  $s \times c \times 10^q$  と表される。

また、 $n$  桁の多倍長精度浮動小数点数どうしの乗算は高速 Fourier 変換 (FFT) を用いることで、 $O(n \log n \log \log n)$  の計算量で行えることが知られている。FFT を倍精度実数で計算した場合、FFT の精度の関係で倍精度実数配列の各要素には 10 進 4 桁までしか格納できないという制約がある。したがって、32 ビット整数には 10 進 9 桁まで格納可能であるが、10 進 4 桁との変換が容易である 10 進 8 桁を採用している。

$n$  桁の多倍長精度浮動小数点数どうしの加減算は、明らかに  $O(n)$  の計算量で行えることが分かる。しかし、多倍長精度浮動小数点数どうしの加減算において、並列化を阻害する要因

はキャリーおよびボローの処理である。これらの処理を並列化するには、桁上げ先見 (carry look-ahead) や桁上げ飛び越し (carry skip) 方式などを用いることが考えられるが、今回の実装では、実現が容易である桁上げ飛び越し方式を並列化して、キャリーの伝搬を処理している。多倍長精度浮動小数点数どうしの減算においても、加算と同様にしてボローの処理が可能である。また、FFT を用いた多倍長精度浮動小数点数どうしの乗算における正規化の処理も、多倍長精度浮動小数点加減算と同様にして処理が可能である。

FFT を用いた多倍長精度浮動小数点数どうしの乗算の並列化においては、並列化された FFT を用いる必要があるが、並列 FFT ライブラリである FFTW を Xeon Phi 向けに最適化したものを用いた。多倍長精度浮動小数点加減乗算においては自動ベクトル化により Xeon Phi の SIMD 命令を用いるとともに、OpenMP による並列化も行っている。

性能評価にあたっては、Xeon Phi において実現した多倍長精度浮動小数点演算と、多倍長精度演算ライブラリである GMP 6.0.0a との性能比較を行った。加算 ( $\pi + \sqrt{2}$ )、乗算 ( $\pi \times \sqrt{2}$ ) のそれぞれに対して 10 進数の桁数  $n$  を  $2^{10} \sim 2^{28}$  まで変化させて連続 10 回実行し、その平均の経過時間を測定した。

評価環境として、Intel Xeon Phi 5110P (8GB、1.053 GHz、60 core) を用いた。実現した多倍長精度浮動小数点演算に対しては、コンパイラは Intel Fortran compiler 15.0.2.164 を用い、コンパイルオプションは “ifort -O3 -mmic -no-prec-div -openmp” を用いた。GMP に対しては、コンパイラは Intel C compiler 15.0.2.164 を用い、コンパイルオプションは “icc-O3 -mmic” を用いた。

GMP においてはアセンブラにより高度に最適化されたルーチンが提供されているが、Xeon Phi は x86 64 アーキテクチャの一部の命令をサポートしていないため、アセンブラによるルーチンを無効にしてビルドを行った。Xeon Phi あたりのスレッド数は 1 および 240 に設定し、ネイティブモードで実行を行った。なお、GMP は並列実行をサポートしていないため、1 スレッドにより実行を行った。

実現した多倍長精度浮動小数点演算と GMP の性能比較について、加算の性能を図 11 に、乗算の性能を図 12 にそれぞれ示す。図 11 から、加算においては 1 スレッドでは実現した多倍長精度浮動小数点演算よりも GNU MP よりも高速であるが、240 スレッド実行において  $n \geq 2^{19}$  では実現した多倍長精度浮動小数点演算が GNU MP よりも高速であることが分かる。

また、図 12 から、乗算においては 1 スレッドでは  $n = 2^{10}$  を除いて、実現した多倍長精度浮動小数点演算が GNU MP よりも高速であることが分かる。さらに、実現した多倍長精度浮動小数点演算において 1 スレッドよりも 240 スレッドが高速になるのは  $n \geq 2^{15}$  であることも分かる。

多倍長精度浮動小数点演算において、キャリーやボローの処理をベクトル化するとともに OpenMP による並列化を行うことで、桁数が大きな領域においては GMP に比べて高速に計算できることを示した。

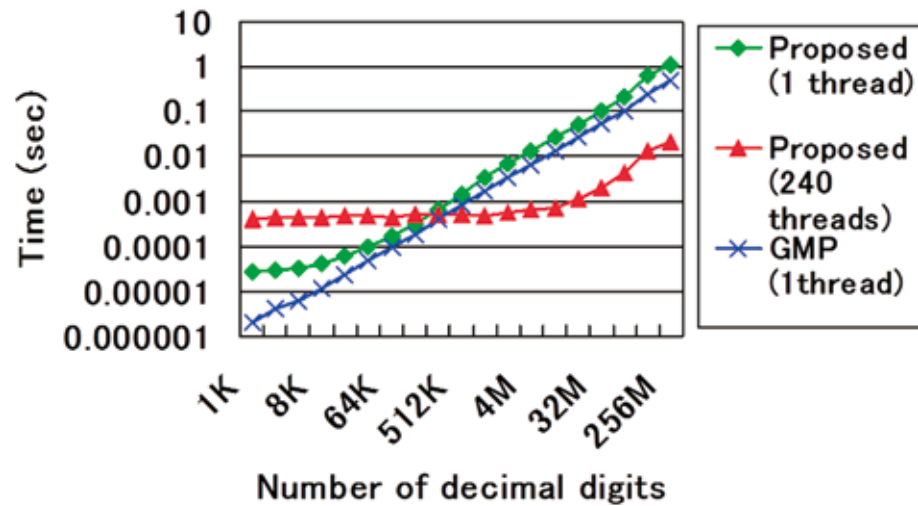


図 11: 多倍長精度浮動小数点加算の性能 (Xeon Phi 5110P、240 スレッド)

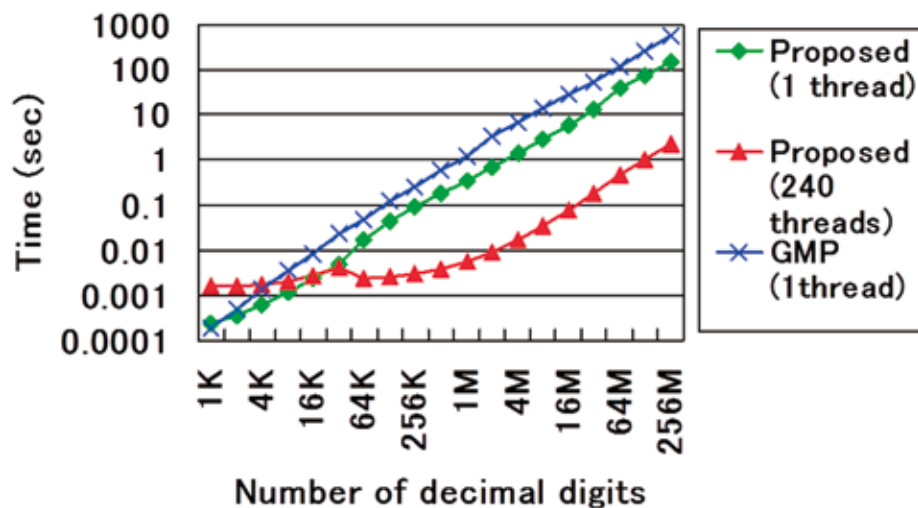


図 12: 多倍長精度浮動小数点乗算の性能 (Xeon Phi 5110P、240 スレッド)

#### 【10】SIMD 命令を用いた整数除算の高速化 (高橋)

整数除算は多くのアプリケーションで広く用いられている演算の一つである。一般的に除算は加減乗算に比べて遅いことが知られている。多くのプロセッサでは整数加減乗算の SIMD 命令がサポートされているが、整数除算の SIMD 命令をサポートしているプロセッサはほとんど存在しないのが現状である。また、逆数を用いて整数除算を求めるアルゴリズムが提案されているが、いずれも SIMD 化は考慮されていない。本研究では、SIMD 命令を用いて複数の被除数と除数に対する符号なし 64 ビット整数除算を高速化し性能評価を行った。

符号なし整数除算は被除数を $a$ 、除数を $b$ とすると、商 $q = \lfloor a/b \rfloor$ および剰余 $r = a - bq$  ( $0 \leq r < b$ )で定義される。提案手法では、IEEE 754 規格に準拠した浮動小数点演算を用いて符号なし 64 ビット整数除算を行う。除算は Newton-Raphson 法を用いると効率よく計算できることが知られている。Newton-Raphson 法により $a/b$ を計算するには、まず $1/b$ を $f(x) = 1/x - b = 0$ の解として以下の反復で計算する。

$$x_{k+1} = x_k + x_k(1 - bx_k) \quad (1)$$

ここで、 $x_k$ と $(1 - bx_k)$ の乗算は $x_{k+1}$ の半分の精度で行うことができる。また、最後の反復では $a/b$ を

$$a/b \approx (ax_k) + x_k\{a - b(ax_k)\} \quad (2)$$

として計算することで、 $a$ と $x_k$ の乗算および $x_k$ と $\{a - b(ax_k)\}$ の乗算は $a/b$ の半分の精度で行うことができる。

Newton-Raphson 法は 2 次収束するので、符号なし 64 ビット整数どうしの除算を行う場合、式(1)により $1/b$ を 32 ビット以上の精度で計算した後に、式(2)を計算すればよいことが分かる。提案手法では、まず単精度浮動小数点演算により初期値 $x_0 \approx 1/b$ を 24 ビットの精度で計算する。次に、倍精度浮動小数点演算により式(1)を 1 回反復すると $x_1 \approx 1/b$ の精度は 48 ビットとなる。最後の反復では式(2)において倍精度浮動小数点演算により $a$ と $x_k$ の乗算および $x_k$ と $\{a - b(ax_k)\}$ の乗算を行い、それ以外は符号なし 64 ビット整数演算により計算することで、符号なし 64 ビット整数の商 $q \approx \lfloor a/b \rfloor$ が得られる。この商 $q$ は $\lfloor a/b \rfloor$ よりも 1 だけ少ない場合があるため、符号なし 64 ビット整数演算により剰余 $r = a - bq$ を計算し、もし $r \geq b$ である場合には $q$ に 1 を加える処理を行う。

提案手法では、IEEE 754 規格の最近接丸めではなく、 $-\infty$ への丸め (切り下げ) を用いる。この場合、初期値 $x_0$ の計算において符号なし 64 ビット整数の除数 $b$ を単精度浮動小数点数に変換する際に $b$ 以下の値に切り下げられるため、 $x_0 > 1/b$ となることがある。ところが、倍精度浮動小数点演算により式(1)を 1 回反復した後は $x_1 \leq 1/b$ となるため、式(2)において $a - b(ax_k) \geq 0$ となり、符号なし 64 ビット整数演算により式(2)を計算しても問題ないことが分かる。

性能評価にあたっては、提案手法に基づく符号なし 64 ビット整数除算と、Intel64 アーキテクチャの符号なし 64 ビット整数除算命令である div 命令、Intel SVML (Short Vector

Mathematical Library) に含まれている符号なし 64 ビット整数除算の組み込み関数との性能比較を行った。被除数は $0 \sim 2^{64} - 1$ の範囲の乱数とし、除数は $1 \sim 2^{64} - 1$ の範囲の乱数とした。256 要素の符号なし 64 ビット整数除算を 100 万回実行し、その平均の経過時間から 1 秒あたりの符号なし 64 ビット整数除算回数 (Mops) を算出した。

評価環境として、Intel Xeon E5-2670 v3 および Intel Xeon Phi 5110P の 1 コア、1 スレッドを用いた。コンパイラは Intel C compiler 16.0.2.181 を用い、コンパイルオプションは Xeon E5-2670 v3 に対しては “icc -O3 -xHOST” を、Xeon Phi 5110P に対しては “icc -O3 -mmic” を用いた。上記のコンパイルオプションを用いた場合、提案手法に基づく符号なし 64 ビット整数除算では、Xeon E5-2670 v3 では逆数の近似値を 11 ビットの精度で計算する `vrcpps` 命令が、Xeon Phi 5110P では逆数の近似値を 23 ビットの精度で計算する `vrcp23ps` 命令が生成される。

提案手法に基づく符号なし 64 ビット整数除算と、Intel64 アーキテクチャの符号なし 64 ビット整数除算命令である `div` 命令、そして Intel SVML に含まれている符号なし 64 ビット整数除算の組み込み関数 (Xeon E5-2670 v3 では `_mm256_div_epu64`、Xeon Phi 5110P では `_mm512_div_epu64`) の性能を表 2 に示す。表 2 から、Xeon E5-2670 v3、Xeon Phi 5110P のいずれにおいても提案手法が `div` 命令や SVML よりも高速であることが分かる。

Newton-Raphson 法を用いるとともに、単精度および倍精度浮動小数点演算を用いて SIMD 化を行うことで Intel64 アーキテクチャの符号なし 64 ビット整数除算命令や Intel SVML に比べて高速に整数除算が行えることを示した。

表 2: 符号なし 64 ビット整数除算の性能 (Mops)

	Xeon E5-2670 v3	Xeon Phi 5110P
提案 手法	129.598	33.692
div 命 令	103.234	10.450
SVML	126.022	29.624

## 【11】データインテンシブサイエンスのためのシステムソフトウェア (建部、川島)

本研究では分散ファイルシステム、大規模データ処理実行基盤の研究を実施し、ポストペタスケールデータインテンシブサイエンスのためのシステムソフトウェアの設計を行い、性能評価を行った。以下、項目別に記述する。

#### ・分散ファイルシステム

研究の狙いは、CPU コア数の増加に対し、アクセス性能がスケールアウトし、かつアクセス応答時間が長くない分散ファイルシステムの研究開発を行うことである。本年度は、これまで研究開発を行ったメタデータサーバ、ローカルストレージをベースに分散ファイルシステムの設計を進め、評価を行った。まず、ローカルストレージを遠隔クライアントからアクセス可能にするためのサーバ設計を行った。このサーバ設計にあたり、クライアントが自ノードの場合は、サーバを経由せず直接ローカルストレージをアクセスする。これによりローカルアクセスの性能向上を図った。図 13 に 512 バイトブロックでアクセスした場合の I/O バンド幅を示す。このベンチマークではそれぞれのサーバノードに 16 クライアントを起動した。サーバを経由しないで直接ローカルストレージをアクセスすることにより 1.9 倍の性能向上を実現した。

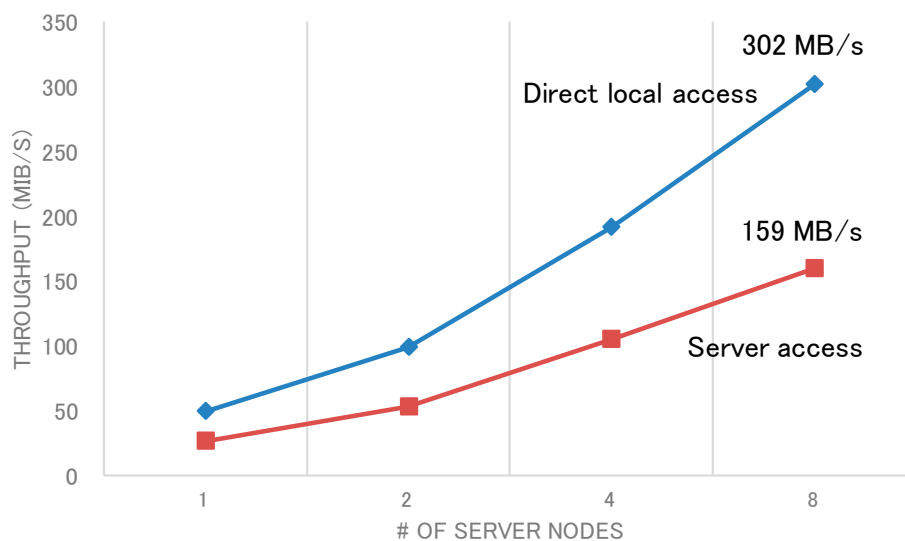


図 13: ストレージサーバ数を増加させたときの 512 バイトブロックアクセス性能

分散ファイルシステムの設計において、ファイルを作成する場合は、まずローカルストレージの利用を試み、利用できない場合はジャンプコンシステントハッシングによりリモートストレージを選択し、オブジェクトを作成し、そのエントリをメタデータサーバに登録する。ただし、この設計の場合、ファイルを作成するたびにストレージにオブジェクトを作成するためファイル作成遅延が増えてしまう。この問題を解決するために、バルクオブジェクト作成、オブジェクトプリフェッチングを提案し、ファイル作成のたびにオブジェクトを作成す



るのではなく、予め複数のオブジェクトを作成することによりファイル作成遅延を隠蔽する性能改善を行った。図 14 にメタデータサーバ数を変更したときのファイル生成性能を示す。このグラフは一秒間に生成したファイル数を示している。

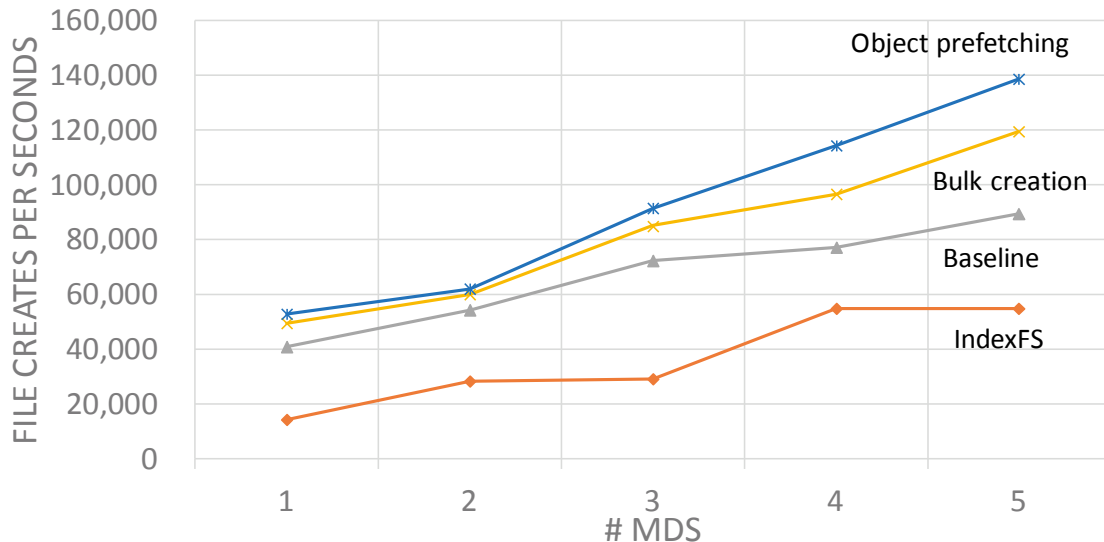


図 14: メタデータサーバ数を変更したときのファイル生成性能

IndexFS は米 CMU の研究者が SC2014 で発表したファイルシステムである。128 メタデータサーバで秒間 842,000 ファイルを作成したと報告され、現時点で最も高速と思われるファイルシステムである。評価では 128 ノードまで準備ができず 5 ノードまでであるが、IndexFS と性能を比較したところ、最適化をしていない baseline の性能でも、同じサーバ数において IndexFS の性能を上回っていた。さらに、バルクオブジェクト生成、オブジェクトプリフェッチングの最適化を行うことにより、5 ノードで毎秒 139,000 ファイルを生成する性能を示した。メタデータサーバ数を増やすことで性能が向上しており、性能向上がそのまま続くとすると 36 ノードで毎秒 1,000,000 ファイルの生成が可能となる。本成果は平成 28 年 12 月に IEEE データサイエンスとシステムに関する国際会議 (DSS) で発表した。

#### ・大規模データ処理実行基盤

本研究項目ではデータインテンシブサイエンスのアプリケーションを効率的に実行するため、MPI-IO、大規模ワークフロー実行、MapReduce 処理、バッチキューイングシステム、データベース管理システムなどの実行環境の研究開発を行う。本研究提案で研究開発する分散ファイルシステムは、全体としてのファイルアクセス性能はスケールアウトさせるように設計、実装を行っているが、ファイルアクセス性能が非均一である。そのため、効率的に利

用するためには、ファイルアクセスの局所性の利用とデータ移動を最小化するプロセススケジューリングが重要となる。

大規模ワークフロー実行の研究では、本年度は信頼性を向上させるため耐障害性の向上に関する研究を行った。これまでも、途中で中断したワークフローは、再実行することにより再開することが可能であったが、この再実行を自動化する試みである。障害については、ワークフロータスクの一時的な障害、ノード障害、タスクのエラーを考慮する。Pwrake ワークフローシステムのマスターの障害については、マスターノードは 1 ノードであるため、ワーカーノードに比べ障害の可能性が極めて低く、手動で再実行することとする。タスクの一時的障害については、失敗したタスクを再実行する。他のノードで再実行しても異常終了する場合は、そのタスクにエラーがあると判断し、ワークフローを中断する。また、あるノードの通信の接続が切れる、あるいはそのノードで複数のタスクが異常終了した場合は、そのノードに障害が発生したと判断し、そのノードを切り離してワークフローを引き続き実行する。タスクを意図的に異常終了させた場合でも正しくワークフローを引き続き実行できることを確認した。また、ワークフローの入出力ファイルは Gfarm ファイルシステムに格納しているが、Gfarm ファイルシステムのサーバ障害についても評価を行った。Gfarm ファイルシステムのサーバ障害に対応するため、Gfarm ファイルシステム中のファイルに対し、ファイル複製を作成する設定にする必要がある。複製を作成した場合でもワークフローの実行時間が数%の増加でおさまること、また、Gfarm のサーバを意図的に異常終了させても正しくワークフローを引き続き実行できることを確認した。本成果は、平成 28 年 11 月に SC2016 併設のクラウド、グリッド、スーパーコンピュータにおけるメニータスクコンピューティングに関する国際ワークショップ (MTAGS) で発表した。

バッチキューイングシステムの研究では、本年度はスケジューリング手法の改良を行った。これまでの手法は、CPU 負荷とアクセス局所性の指標を、パラメタ  $\beta$  を用い統合していたが、最適なパラメタ  $\beta$  の決定が難しかった。一方で、CPU 負荷については、動的な CPU 負荷を指標にするより、利用コア数に相当するスロット数で割り当てることで十分である。このことを利用し、提案手法の方針を見直した。具体的には、CPU 負荷については考慮せず、スロット数だけを考慮する。また、それぞれのジョブについて CPU インテンシブであるか、I/O インテンシブであるかを示す指標として RDR (Remote Degradation Ratio) を定義する。RDR はそれぞれのジョブに対し定義され、全てのアクセスがローカルストレージであった時のジョブの実行時間を  $L$ 、全てのアクセスがリモートストレージであった時のジョブの実行時間を  $R$  としたとき、 $(R-L)/L$  で定義する。この指標は、リモートアクセスによるジョブの実行時間の延びの程度を示し、つまり I/O インテンシブな度合いを示している。改善したスケジューリング手法では、スケジューリングのスコアとして RDR にリモートにあるファイルサイズの割合をかけたものを用いる。スコアが大きい場合は、実行時間の延びが大きいこと

を示し、スコアが小さくなるようにスケジューリングを行う。この手法の評価を行い、これまでの手法より性能を向上させられることを示した。本成果は、平成 28 年 11 月に SC2016 併設のクラウドにおけるデータインテンシブコンピューティングに関する国際ワークショップ（DataCloud）で発表した。

## 【12】エクストリームビッグデータの基盤技術（建部、川島）

エクストリームビッグデータ（EBD）アプリケーションの実行に求められる、数万～数十万プロセスからの並列アクセスを想定した IOPS、プロセス数に比例した読込、書込アクセスバンド幅性能を目標として、分散オブジェクトストアの設計の最適化をすすめた。本年度は、フラッシュストレージを前提としてオブジェクトの生成、参照の性能を向上させるため設計してきたローカルオブジェクトストアについて、これまでの成果をまとめた論文が *Journal of Information Processing* に掲載された。さらに、数多くのアプリケーションからのアクセスを可能にするため、分散メタデータサーバ PPMDS を用いて、POSIX インターフェースをもつ分散オブジェクトストアの設計を行った。POSIX インターフェースはアプリケーションが標準的に用いているインターフェースであり、このインターフェースにより利用するアプリケーションの数を飛躍的に向上させることができる。分散メタデータサーバ PPMDS は POSIX インターフェースで必要な階層的な名前空間を分散サーバで管理する。またオブジェクトはジャンプコンシステントハッシングを用いて分散させる。

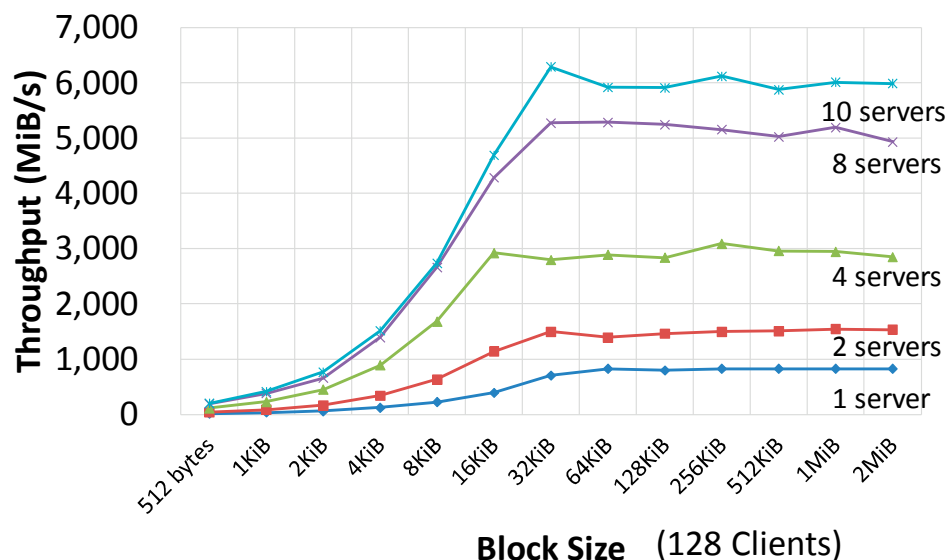


図 15: 分散オブジェクトストアのノード数を変えた時の書込性能

図 15 に HPC でよく用いられる IOR ベンチマークにより、128 クライアントプロセスがそれぞれ 128 MiB のオブジェクトを生成するときの書き込み性能を示す。分散オブジェクトス

トアの数を増やすにつれ、およそ 630 MiB/s の書き込みバンド幅が増加しており、スケーラブルな性能向上を示している。書き込み性能については、ジャンプコンシステントハッシングにより偏りのない書き込みを行っているため、サーバ数が増えた時にスケーラブルな性能向上が期待される。本成果は、データサイエンスシステムに関する IEEE 国際会議で発表した。

また同じプロジェクトの共同研究者である理化学研究所の三好グループとのコデザインとして、全メッシュ点についての近傍データの検索の高速化を図った。近傍データは移動するため、全メッシュ点について検索は一度しか行われたい。そのため、インデックス生成と検索の両方を合わせたうえでの高速化が重要となる。このため、STR R (sort-tille-recursive-R) 木におけるインデックス生成の最適化として、データを一斉に用いてインデックス生成を行うバルクローディング手法の開発と、並列ラディックスソート、並列ノードパッキングによる高速化を行った。検索についてもマルチスレッドによる並列検索と並列擬陽性チェックによる最適化を行った。これにより従来の R 木を用いた方法に比べ 26.8 倍の高速化を達成した。

### 【13】分散ファイルシステム及びグリッド・クラウド技術に関する研究（建部）

文部科学省が進める革新的ハイパフォーマンズコンピューティングインフラ（HPCI）の HPCI 共用ストレージ、素粒子物理学データ共有システム JLDG のシステムソフトウェアとしても利用される Gfarm ファイルシステムの研究開発を行った。本年度は、ディレクトリクォータ管理機能の設計と実装、並列コピーのスケジューリングの改善、分散メタデータサーバの設計、RDMA（Remote Direct Memory Access）による高速アクセス機能の実装を行った。ディレクトリクォータ管理機能は、これまでのユーザ、グループによるファイル数、ファイルサイズなどのクォータ管理とは異なり、あるディレクトリ以下のファイルについてクォータ管理を行う機能である。このとき、ユーザ、グループは問わない。ディレクトリクォータ機能は UNIX では XFS で実装されている。XFS ではディレクトリクォータはプロジェクトクォータと呼ばれ、グループクォータ機能との排他利用である。そのため、利用用途が限られてしまう。Gfarm ファイルシステムでは、グループクォータ機能とともに用いることができ、かつオーバーヘッドの少ないディレクトリクォータ機能の設計を行った。本機能は、HPCI 共用ストレージにおいてサブグループのクォータ管理を実施したいという要求を満たすために設計、実装したものである。並列コピーのスケジューリングの改善は、並列コピーを異なるクライアントで同時に実行したとき、書き込み先を衝突しないようにするものである。同時に実行する場合、書き込み先情報が同じであり、ファイル容量、CPU 負荷で選択すると同じ書き込み先が選ばれてしまう。これを回避するため、なるべく多くの書き込み先に対しラウンドロビンでスケジューリングする方式を設計し、実装した。分散メタデータサーバの設計は、ファイルシステムにおけるファイル数の増加、また多数クライアントからのア

アクセス集中を回避するためのものである。RDMA による高速アクセス機能は、ファイルアクセスを高速化するため、データ転送に RDMA を用いるものである。設計のポイントは、これまでの RDMA ではないソケット通信のクライアントからのアクセスと RDMA によるアクセスの両方を可能にすることと、安定性を保持するためあまり大きな開発を必要としないで性能向上を図ることである。そのため、主要なデータアクセスプロトコルである PREAD と PWRITE プロトコルに対し RDMA 版を設計し、RDMA が利用できない環境の場合はこれまでのソケットベースの PREAD と PWRITE を用いることとした。性能評価の結果を図 16 に示す。

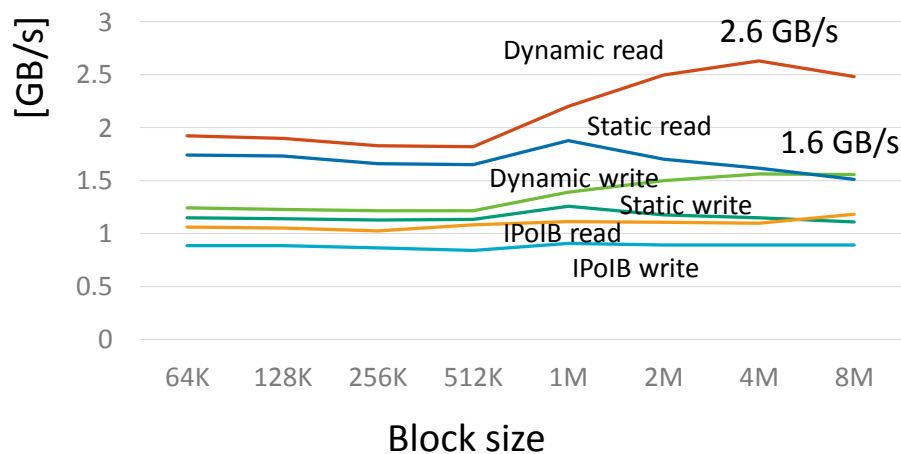


図 16: それぞれの通信方式におけるアクセスバンド幅

RDMA を用いたアクセスではメモリ登録を動的に行う Dynamic 方式の性能が高く、読み込みで 2.6 GB/s、書き込みで 1.6 GB/s の性能を達成した。これらの成果は平成 29 年 3 月 27 日にリリースした Gfarm バージョン 2.7.3 に含まれている。

#### 【1 4】高性能なログ先行書込みに関する研究（川島、建部）

フラッシュストレージをログ用のストレージデバイスとする時にふさわしい WAL プロトコルとして P-WAL を提案した。フラッシュストレージは複数のメモリチップに対して並列にアクセスすることで高い性能を発揮する。P-WAL はフラッシュストレージの特性を活用し、各ワーカーが専用の領域にログを書込む並列ログ書込み方式を用いる。この方式により従来の直列 WAL 方式で発生する、排他制御処理とストレージ I/O に伴う性能低下問題を解決する。P-WAL をトランザクションシステム上で実装し、性能評価を行った。その結果を

図 17 に示す。P-WAL は直列 WAL 方式に対してマイクロベンチマークで 10.0 倍、TPC-C ベンチマークにおいて 2.3 倍の性能向上を示した。本成果は情報処理学会論文誌で発表した。

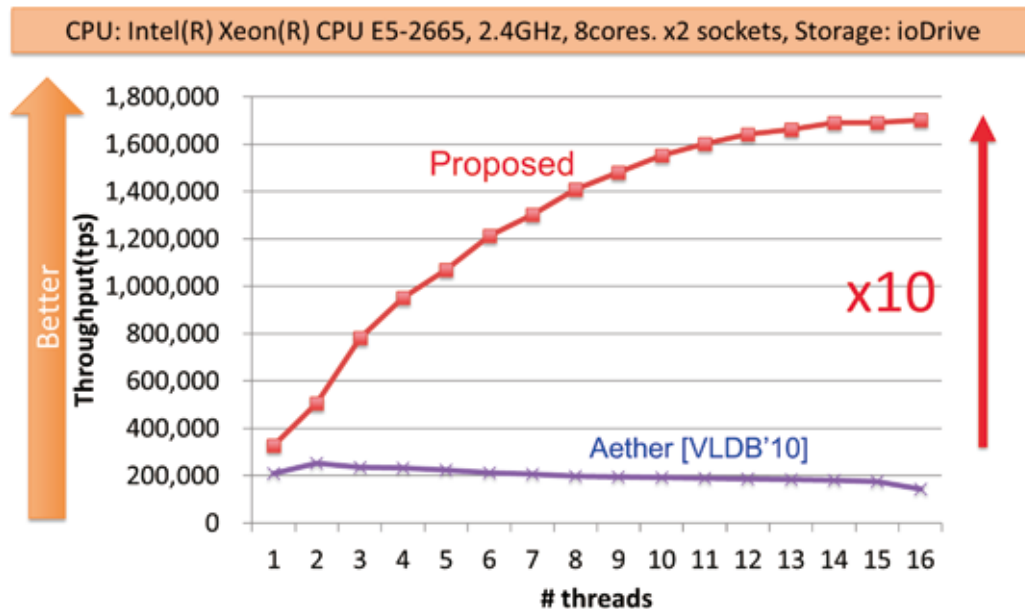


図 17: P-WAL の性能評価

### 【15】高性能な分散トランザクション処理に関する研究（川島、建部）

分散データベース管理システムにおいて外部キー制約や二次索引、実体化ビューの管理を行うための高性能な処理方式として Read Atomic Multi-Partition (RAMP) トランザクションがある。RAMP トランザクションは隔離性を緩和することで高性能化が実現されているが、それを先進的デバイスによって高性能化する技法は未開拓である。そこで、本研究では高性能インターコネクトである InfiniBand を利用し、Remote Direct Memory Access (RDMA) の機能を用いて RAMP トランザクションを高速化する手法を提案した。まず、RDMA-Write による GET/PUT オペレーションの高速化手法として GET+/PUT+ 方式を提案した。続いて、RDMA-Read による更なる GET オペレーションの高速化手法として GET\* 方式を提案した。提案手法の評価のため、プロトタイプ In-Memory Key-Value Store を実装した。Yahoo! Cloud Serving Benchmark を用いた実験において、従来方式と比べて提案手法は最大 2.67 倍の高速化を達成した。これを図 18 に示す。研究成果は IEEE BigComp を式に採択され、Best Paper Award on Big Data Processing (runners-up 同等)を受賞した。その後、情報処理学会論文誌に採録された。

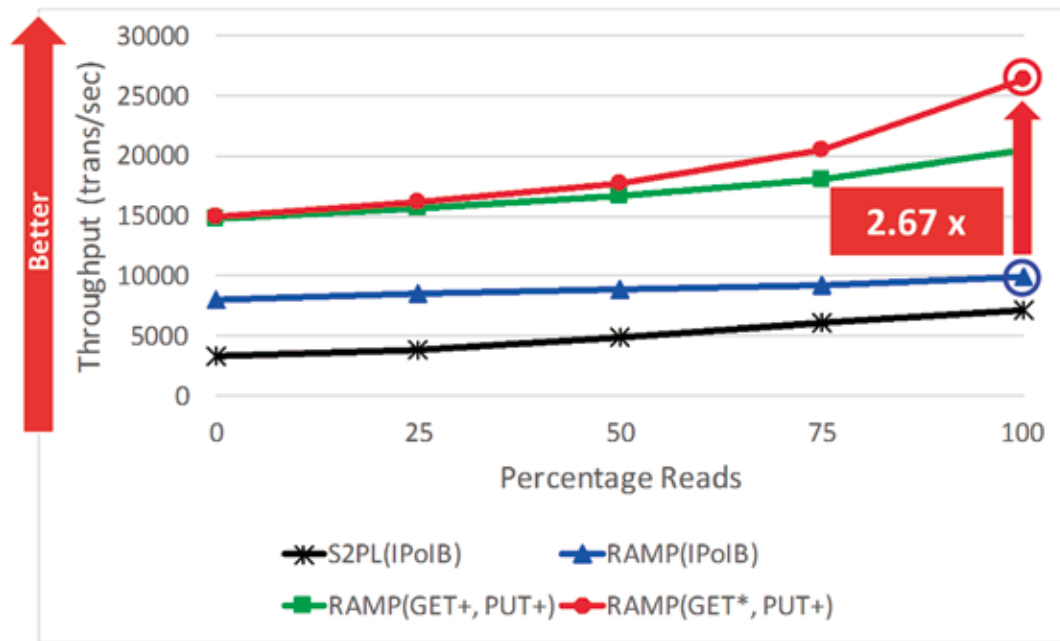


図 18: InfiniBand RDMA による In-Memory Key-Value Store 実装の評価

#### 【16】高性能な空間索引に関する研究（川島、建部）

本研究の対象は空間結合殻カウントである。空間結合殻カウントとは、空間結合を行った後にカウントを行う処理である。空間結合殻カウントは天文学においては、halo 周辺に存在する particle の数を数え上げる処理となる。この処理はシミュレーション結果に対して一度だけ実行される。空間結合殻カウントの効率化には、効率的な空間結合が必要である。そこで我々は CPU に最適化した sort-tilde-recursive-R 木を提案した。提案手法は並列基数整列法、並列ノード梱包法、そして single instruction multiple data 命令を活用した。天文データを用いた実験において、提案手法は高性能 R 木に対して 26.8 倍の性能改善を示した。これを下図に示す。我々は更に主記憶に収まらない大規模データを扱うために、局所実体化法を提案した。この方式を効率化するために、我々は構築・検索・破壊パイプライン法を提案した。提案方式は従来技法に比べて 27.5 倍の高性能化を達成した。コードは GitHub で公開済である。また、成果は Workshop of Big Data Challenges、Research、and Technologies in the Earth and Planetary Sciences held as part of the IEEE Big Data Conference で報告した。



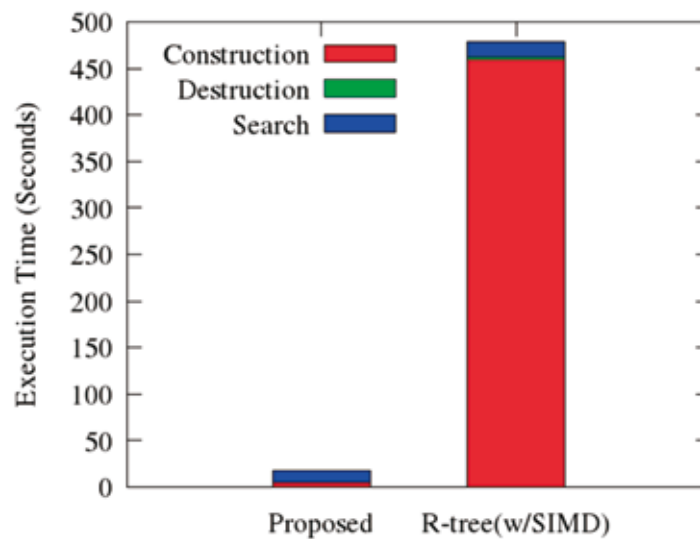


図 19: 高性能 R 木における性能向上

### 【17】高性能な暗号化データ処理に関する研究（川島、建部）

暗号化データベースシステムでは暗号文上での関係演算子の使用が可能である。一方、このシステムの欠点はデータ処理コストの増加にある。本研究では加算演算子に着目し、暗号化データベースシステムにおける総和計算処理の並列化手法を提案した。本手法はタスク並列性を活用し、細粒度のデータオブジェクトを各スレッドに割り当てることで高速化を実現した。プロトタイプシステムを C++ および OpenMP を利用して実装し、提案手法の評価を行った。提案手法を naïve な手法と比較した結果、グルーピング演算を伴う総和計算問合せ処理において、提案手法は最大で 69.91 倍の高速化を達成した。この成果の一部は IEEE BigComp の成果で報告した。

### 【18】複数シフト・複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式に対する高精度数値解法に関する研究（多田野）

複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式  $AX = B$ （以下、シード方程式）と、複数シフトパラメータをもつ連立一次方程式  $(A + \sigma D)X = B$ （以下、シフト方程式）を同時に解く数値解法であるシフトブロッククリロフ部分空間反復法に関する研究を実施した。シフトブロッククリロフ部分空間反復法では、シード方程式はブロッククリロフ部分空間反復法によって解かれる。ブロッククリロフ部分空間反復法は、各右辺に対してクリロフ部分空間反復法を適用するよりも少ない反復回数で近似解が得られる可能性がある解法である。また、シード方程式に対しては、生成されるブロッククリロフ部分空間がシード方程式と等しい性質を用いることにより、少ない計算量で近似解更新を行うことができる。しかしながら、シフト方



程式の近似解の精度は誤差の影響を受けやすく、反復の停止条件を満たした場合でも目的の精度に到達しないことがある。今年度は、シフトブロッククリロフ部分空間反復法の 1 つである、Shifted Block BiCGGR 法におけるシフト方程式の近似解の精度劣化原因について、数値的に解析を行った。

シフトブロッククリロフ部分空間反復法では、シード方程式の残差行列とシフト方程式の残差行列が同一のブロッククリロフ部分空間に属することを前提条件として、アルゴリズムが構築されている。本研究では、シード方程式の残差が属する部分空間と、シフト方程式の残差が属する部分空間を最大正準角を用いて比較を行い、近似解の精度劣化との関連性を調べた。最大正準角は 2 つの空間を比較する際に用いられる指標であり、最大正準角が  $0^\circ$  であれば 2 つの空間は等しいことを示す。

Shifted Block BiCGGR 法において、シフト方程式の近似解精度劣化と、2 つの残差が属する部分空間の差の関連性を調べる。シフト方程式の計算を単純に実装したものを従来版と呼び、縦長行列と小行列の積がなるべく現れないように改良したものを改良版と呼ぶ。テスト問題として、格子量子色力学計算 (QCD) で現れる連立一次方程式を用い、シフトパラメータ  $\sigma$  は  $1.0 \times 10^{-4}$  とした。図 20 に、右辺ベクトル数を変化させたときのシード方程式、シフト方程式 (従来版)、及びシフト方程式 (改良版) の真の相対残差の変化を示す。なお、真の相対残差は近似解の精度の指標であり、この値が小さければ高精度の近似解が得られていることを示している。図 20 より、シード方程式の近似解は右辺ベクトル数によらず、高精度に計算できていることがわかる。しかしながら、シフト方程式の近似解は、右辺ベクトル数が増加すると真の相対残差の値が大きくなっており、高精度の近似解が得られていないことがわかる。右辺ベクトル数が 24 本の場合のシフト方程式の真の相対残差は、従来版では  $2.6 \times 10^{-4}$ 、改良版では  $6.9 \times 10^{-8}$  であった。

図 21 に、右辺ベクトル数が 24 本の場合の 2 つの部分空間が成す最大正準角の変化と、真の相対残差の変化を示す。図 21 (a) に示すように、最大正準角は反復開始直後は  $0^\circ$  となっており、シード方程式とシフト方程式の残差が属する部分空間は等しい。しかしながら、従来版では 150 回目の反復付近で最大正準角が急激に大きくなり、230 回目の反復付近でほぼ  $90^\circ$  になった。一方、改良版では 300 回目の反復付近で最大正準角が急激に大きくなっており、400 回目の反復付近でほぼ  $90^\circ$  になった。また、図 21 (b) に示すように、真の相対残差は最大正準角が  $90^\circ$  に収束するまでは減少しており、最大正準角の増加が遅い改良版では真の相対残差はより小さな値に到達できている。この結果より、シード方程式とシフト方程式の残差が同じ部分空間に属するという条件が崩れると、近似解精度が悪化することがわかった。最大正準角の増加を抑える手法を構築できれば、今後更なる近似解精度の向上が可能と考えられる。

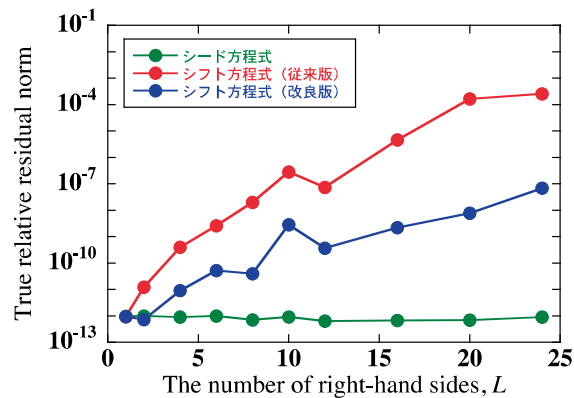
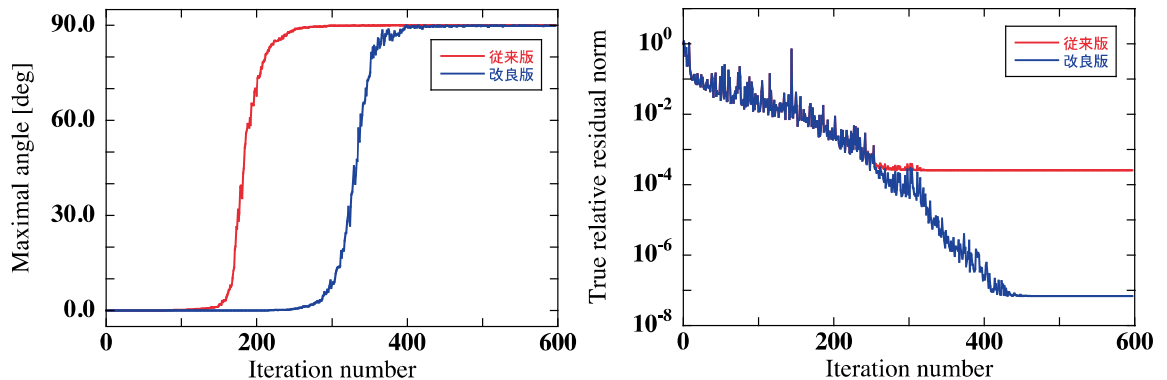


図 20: 右辺ベクトル数の変化に対する真の相対残差の変化



(a) 2つの部分空間が成す最大正準角変化

(b) 真の相対残差の変化

図 21: 右辺ベクトル数  $L=24$  の場合の 2つの部分空間が成す最大正準角変化と真の相対残差の変化

### 【19】 Large Eddy Simulation で現れる 3次元ポアソン方程式の求解高速化に関する研究 (多田野)

地球環境研究部門の日下グループとの共同研究として、Large Eddy Simulation (LES) で現れる 3次元ポアソン方程式の求解高速化についての研究を行った。気象分野における LES では、圧力や速度の時間発展計算に 3次元ポアソン方程式が現れ、その求解に多くの計算時間を要していることから高速化が必要不可欠となっている。この 3次元ポアソン方程式は有限差分法を用いて離散化され、最終的に大規模対称疎行列をもつ連立一次方程式に帰着される。

LES で現れる連立一次方程式に対してマルチグリッド法を前処理に用いた反復法を適用し、その性能を評価した。用いた反復法は、両側前処理を施した共役勾配法 (CG 法)、共役残差法 (CR 法) と、右側前処理を施した Orthomin(1)法である。また前処理として、単精度、及び倍精度のマルチグリッド法を用いた。連立一次方程式のサイズは 20,709,376、係数行列

の非零要素数は 144,441,344 であり、LES の 101 タイムステップで現れる 101 本の連立一次方程式を解く。初期解の与え方として、以下の 2 種類を採用した。

- ・ Type I：全タイムステップで初期解を **0** で与える
- ・ Type II：第 0 ステップの初期解は **0**、以降は前ステップで得られた近似解を与える

計算機環境として CPU : Intel Xeon E5-2620 2.4GHz (1 コアのみ利用)、メモリ : 64GB、コンパイラ : gfortran ver. 5.3.1、コンパイルオプション : -O3 を用いた。

図 22 に 101 本の連立一次方程式を解くのに要した計算時間を示す。CR 法と Orthomin(1) 法は、CG 法よりも高速に求解可能であることがわかった。また、マルチグリッド前処理を用いることにより計算時間を更に短縮することができ、前処理部分のみを単精度で計算することで若干の高速化を図ることができた。図 22 (b) に示すように、前ステップで得られた解を初期解に採用することで高速化が可能であることがわかった。単精度マルチグリッド前処理付き Orthomin(1)法において、前ステップの近似解を初期解に用いた場合が最も高速で、101 本の連立一次方程式を 101.8 秒で解くことができた。また、図 23 に 101 本の連立一次方程式を解くのに要した平均反復回数を示す。単精度と倍精度のマルチグリッド前処理を用いた際の平均反復回数は等しいことから、前処理には単精度のマルチグリッド前処理で十分であることがわかった。

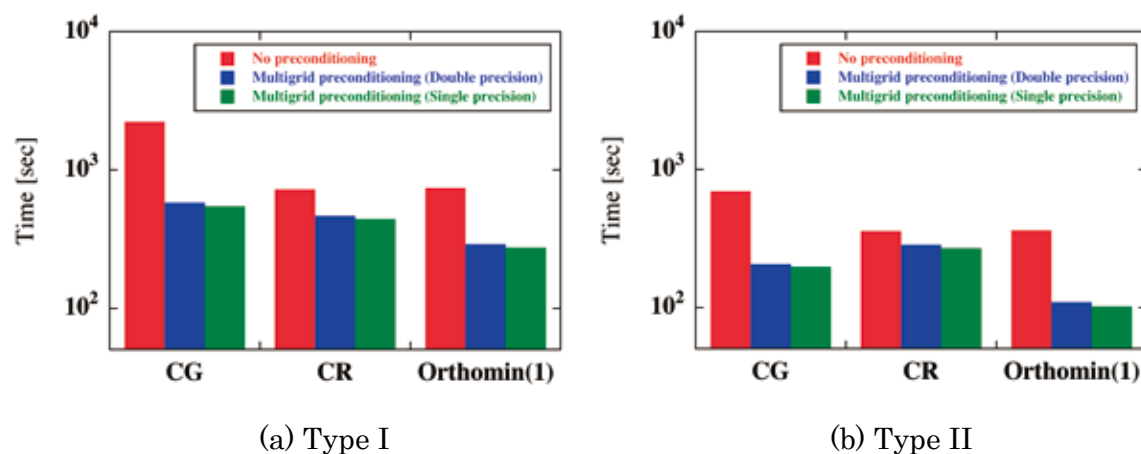


図 22: 101 本の連立一次方程式を解くのに要した計算時間

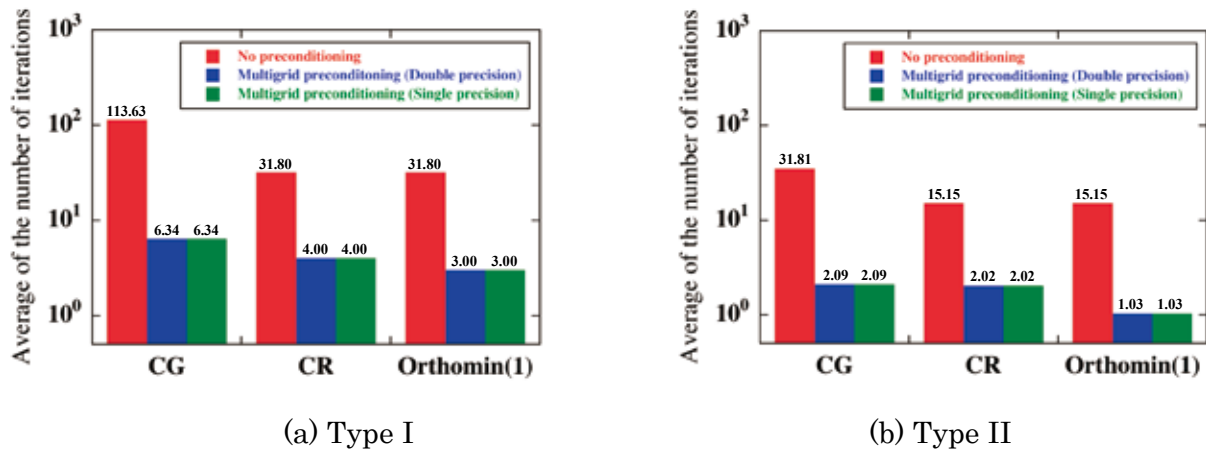


図 23: 101 本の連立一次方程式を解くのに要した平均反復回数

## 【20】高速な Verilog HDL シミュレータの開発 (小林)

ハードウェア記述言語による FPGA カスタムコンピューティングシステムの開発は未だデファクトスタンダードであり、RTL (Register Transfer Level) シミュレーションは設計したハードウェアの挙動が設計者の意図と一致しているかを保証する重要な工程である。一方、FPGA 上に大規模なハードウェアを実装するには長い RTL シミュレーション時間を必要とし、それは既存の RTL シミュレータでは現実的な時間内でハードウェアの挙動を検証することが困難であることを意味している。また、FPGA に実装可能な回路規模は、半導体プロセス技術の進歩の恩恵により年々増加している。そのため FPGA に実装されるハードウェアの規模は増大し、それに比例してハードウェアの検証に要する時間は増えることが予想されるので、今後はそのような問題を解決する高速な RTL シミュレーション環境が必要となる。そのため本研究では、既存の 2 つの技術、ArchHDL と Pyverilog を活用した新しい高速な Verilog HDL シミュレータを提案・実装した。図 24 にシミュレータの概要を示す。

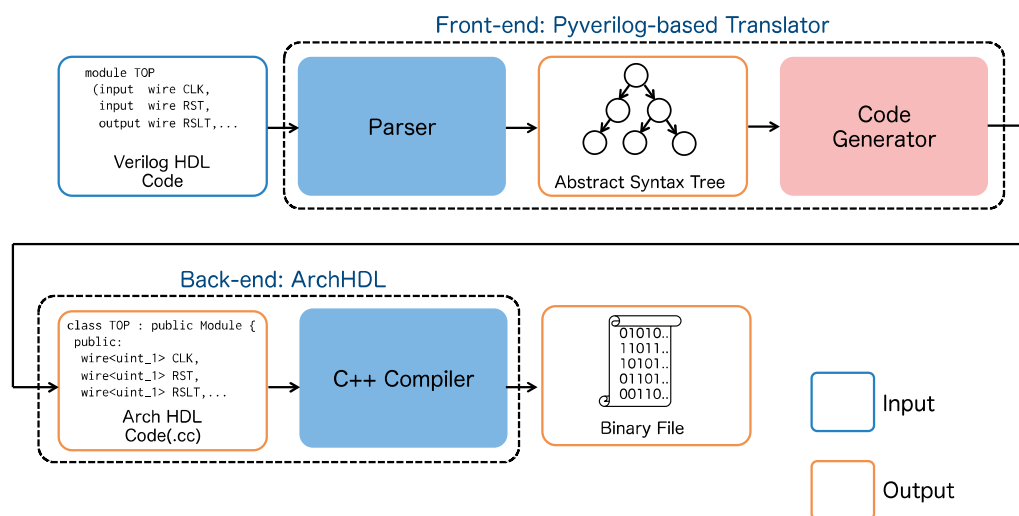


図 24: 高速な Verilog HDL シミュレータの概要



図 25: Verilog HDL コードと ArchHDL コードの対応関係

ArchHDL はシミュレーションエンジンとして利用される。ArchHDL は C++11 をベースとした RTL モデリングとシミュレーションのためのライブラリであり、RTL シミュレーションは OpenMP によって並列化が可能であるため、シミュレーション時間を短縮することが可能である。一方、Pyverilog は Verilog HDL のソースコードから ArchHDL のコードに変換するトランスレータの実装に活用される。図 25 に Verilog HDL コードと ArchHDL コードの対応関係を示す。図中の点線で囲まれた部分がそれぞれのコードが同じ機能を実現している。ここで留意してほしいのが、Verilog HDL コードでは FMUL、FADD のようなサブモジュールを関数呼び出しのような形でインスタンス化できるが、ArchHDL コードではサブモジュールのポートが呼び出し元のどのワイヤ・レジスタに接続されているかを明記しなければならない。そのため、Verilog HDL コードから ArchHDL のコードに変換するためには、Verilog HDL のソースコードを解析し、どのようなハードウェア構造であるかを示す情報を取得する必要がある。そのためこのトランスレータの実装には、Verilog HDL のデザイン解析・コード生成のための Python ベースのオープンソースツールキット Pyverilog を利用している。Verilog HDL のソースコードをトランスレータによって ArchHDL コードに変換し、それを gcc や Intel Compiler などの標準的な C コンパイラでコンパイルすることによってシミュレーション用の実行バイナリが生成される。

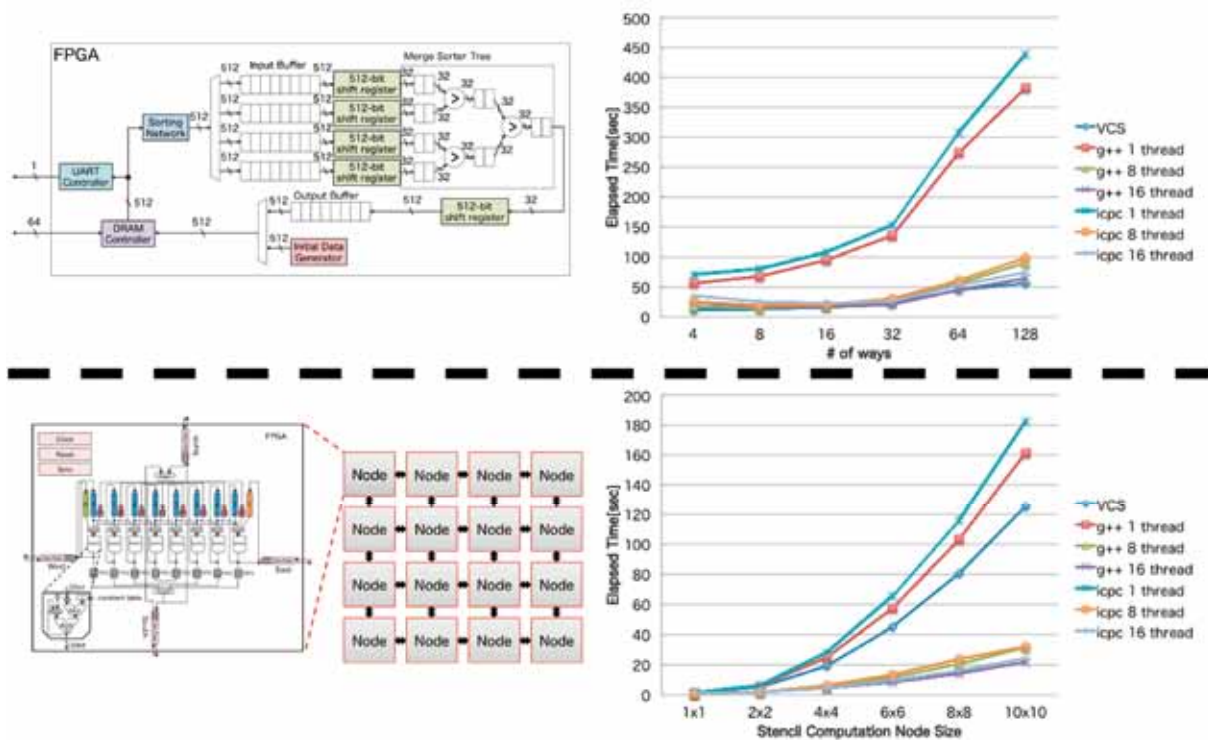


図 26: ソーティング用とステンシル計算用 FPGA アクセラレータの検証に要するシミュレーション時間 (上がソーティング用、下がステンシル計算用)。ソーティングアクセラレータのシミュレーション時間における、横軸の way 数はソーティングアクセラレータ内の Merge Sorter Tree の葉の数を意味している。

図 26 に商用の高速なシミュレータである Synopsys VCS (Verilog Compiler Simulator) と開発した Verilog HDL シミュレータのシミュレーション時間を示す。シミュレーション用のハードウェアとして、ソーティングアクセラレータとステンシル計算用アクセラレータを用いた。ソーティングアクセラレータのシミュレーションにおいては、16 スレッド利用した場合のシミュレーション時間は VCS のシミュレーション時間とほとんど同じであった。これは、OpenMP によるシミュレーションの並列化の効果はあるものの、計算機の主記憶にアクセスする頻度が多くオーバーヘッドが顕在化しやすいシミュレーションであることに起因している。一方、ステンシル計算用アクセラレータのシミュレーションにおいては、g++ でコンパイルし 16 スレッドを用いた結果、VCS と比較して 1.2 倍から最大 5.8 倍の高速化となった。これは、ソーティングアクセラレータとは異なり、ステンシル計算用アクセラレータは OpenMP によって並列シミュレーションが可能である部分が多い構成であることに起因している。つまりシミュレーションのオーバーヘッドが顕在化しにくいハードウェアであることを意味している。このようにハードウェアの種類によって、VCS に対するシミュレーション

速度比は異なるが、開発したシミュレータに適さないハードウェアであっても VCS と同等、それ以外なら大幅な性能差を達成していることが分かる。

現時点では、開発したシミュレータが対応できる Verilog HDL の構文は少ないため、シミュレーションできるハードウェアはある程度限定されている。そのため、今後は対応可能な構文を増加させてあらゆるハードウェアのシミュレーションを可能にし、開発したシミュレータの有用性をさらに評価していく。

#### 4. 教育

学生の指導状況（学生氏名，学位の種類，論文名）

##### 博士学位論文

1. 鷹津冬将，博士（工学），ポストペタスケールシステム向け高性能分散ファイルシステムに関する研究，筑波大学大学院システム情報工学研究科博士論文，平成 29 年 3 月（指導教員：建部修見）
2. 李燮鳴，博士（工学），A Study on Data-Aware Scheduling for Post-Peta Scale Systems（ポストペタスケールシステムにおけるデータ配置を考慮したタスクスケジューリング），筑波大学大学院システム情報工学研究科博士論文，平成 29 年 3 月（指導教員：建部修見）

##### 修士学位論文

1. 桑原悠太，修士（工学），GPU クラスタにおける GPU セルフ MPI に関する研究，筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文，平成 29 年 3 月（指導：朴泰祐）
2. 佐藤賢太，修士（工学），密結合並列演算加速機構における汎用通信ライブラリの実装と評価，筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文，平成 29 年 3 月（指導：朴泰祐）
3. 馬浩宇，修士（工学），Implementation for High Performance Homology Search on Gfarm File System（Gfarm ファイルシステムにおける高性能相同性検索の実装），筑波大学大学院システム情報工学研究科修士論文，平成 29 年 3 月（指導：建部修見）
4. 堀尾健太郎，修士（工学），暗号化データ処理の高性能化に関する研究，平成 29 年 3 月（指導：川島英之）
5. 神谷孝明，修士（工学），並列ログ先行書き込み方式に関する研究，平成 29 年 3 月（指導：川島英之）



6. 三橋龍也、修士（工学）、大規模な空間結合集約の高性能化に関する研究、平成 29 年 3 月（指導：川島英之）

## 卒業論文

1. 松村和朗、学士（工学）、アクセラレータ用言語 OpenACC のマルチ GPU 実行環境への適用、筑波大学情報学群情報科学類卒業論文、平成 29 年 3 月（指導：朴泰祐）
2. 吉川直宏、学士（工学）、RNN による Git のコミットメッセージ自動生成、筑波大学情報学群情報科学類卒業論文、平成 29 年 3 月（指導：高橋大介）
3. 岩井厚樹、学士（工学）、並列ベンチマークのための同期複数タスク実行フレームワークの設計、筑波大学情報学群情報科学類卒業論文、平成 29 年 3 月（指導：建部修見）
4. 小林淳司、学士（工学）、並列離散イベントシミュレータを用いた分散メタデータサーバの性能評価、筑波大学情報学群情報科学類卒業論文、平成 29 年 3 月（指導：建部修見）
5. 梶原顕伍、学士（工学）、分散合意手法 Raft の高性能化、筑波大学情報学群情報科学類卒業論文、平成 29 年 3 月（指導：川島英之）
6. 渡邊敬之、学士（工学）、Masstree の効率的な構築に関する研究、筑波大学情報学群情報科学類卒業論文、平成 29 年 3 月（指導：川島英之）
7. 中村泰大、学士（工学）、タイムスタンプに基づく並行実行制御と並列ログ先行書き込みの結合、筑波大学情報学群情報科学類卒業論文、平成 29 年 3 月（指導：川島英之）

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 【受賞】

1. 情報処理学会 HPCS2016 シンポジウム最優秀論文賞：佐藤賢太，藤田典久，埴敏博，松本和也，朴泰祐，Khaled Ibrahim, "密結合並列演算加速機構 TCA による GPU 対応 GASNet の実装と評価"
2. NVIDIA Best Paper Award: Hiroshi Maeda and Daisuke Takahashi, "Parallel Sparse Matrix-Vector Multiplication Using Accelerators", 16th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2016), Beijing, China, July 6, 2016.



3. Best paper award on big data processing (runner-up), Naofumi Murata, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, Accelerating Read Atomic Multi-partition Transaction with Remote Direct Memory Access, IEEE International Conference on Big Data and Smart Computing, 2017.
4. 平成 28 年度山下記念研究賞 (SIGOS)、川島英之、縮退表現に基づくシーケンスパタン集合の圧縮、情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS)、Vol. 2016-OS-136, No. 13, pp. 1-6.
5. 平成 28 年度電子情報通信学会 情報・システムソサイエティ (ISS) 査読功労賞、川島英之
6. 平成 28 年度筑波大学システム情報系教育貢献賞 (推薦)、川島英之
7. 筑波大学 BEST FACULTY MEMBER2016, 朴泰祐, 2017 年 2 月 20 日

#### 【外部資金】

1. JST CREST、朴泰祐 (研究代表者)、H23～H29 年度、24,883 千円 (H28)、研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」、研究課題「ポストペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発」
2. 理化学研究所共同研究、朴泰祐 (研究代表者)、H27～H31、8,000 千円 (H28)「ポスト京のプロセッサアーキテクチャ、電力制御技術、システムソフトウェアおよび数値計算ライブラリに関する研究」
3. JST CREST、高橋大介 (共同研究者)、H23～28 年度、14,950 千円 (H28)、研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」、 「数値計算ライブラリによる超並列複合システムの階層的抽象化に関する研究」
4. 科学研究費補助金 基盤研究 (C)、高橋大介 (代表)、H28～30 年度、1,430 千円 (H28 年度)、「メニーコア超並列クラスタにおける有理数演算ライブラリに関する研究」
5. JST CREST 研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」, 「ポストペタスケールデータインテンシブサイエンスのためのシステムソフトウェア」, H23 年度～H28 年度, 18,200 千円 (H28) (代表: 建部修見)
6. JST CREST 研究領域「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」, 「EBD: 次世代の年ヨッタバイト処理に向けたエクストリームビッグデータの基盤技術」, H25～H30 年度, 14,950 千円 (H28) (主たる共同研究者: 建部修見)

7. JST CREST、川島英之（共同研究者）、H26～30 年度、15,680 千円（H28）、研究領域「科学的発見・社会的課題解決に向けた各分野のビッグデータ利活用推進のための次世代アプリケーション技術の創出・高度化」、「広域撮像探査観測のビッグデータ分析による統計計算宇宙物理学」
8. 科学研究費補助金 基盤研究 (C)、川島英之（代表）、H28～30 年度、2,100 千円（H28 年度）、「先進的デバイスの利活用による高性能データ基盤システムに関する研究」
9. 科学研究費補助金 若手研究 (B)、多田野寛人（代表）、H27～28 年度、910 千円（H28 年度）、「複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式に対する高精度・高効率アルゴリズムの開発」

#### 【知的財産権】

（該当なし）

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. 廣川 祐太, 朴 泰祐, 佐藤 駿丞, 矢花 一浩, "電子動力学シミュレーションのステンスル計算最適化とメニーコアプロセッサへの実装", 情報処理学会論文誌コンピュウティングシステム (ACS) , Vol. 9, No.4, pp. 1-14, 2016.
2. 佐藤賢太, 藤田典久, 塙敏博, 松本和也, 朴泰祐, Khaled Ibrahim, "密結合並列演算加速機構 TCA による GPU 対応 GASNet の実装と評価", 2016 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2016) 論文集, 2016.
3. 廣川祐太, 朴泰祐, 佐藤駿丞, 矢花一浩, "電子動力学シミュレーションのステンスル計算に対するメニーコアプロセッサ向け最適化", 2016 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2016) 論文集, 2016.
4. Kenta Sato, Norihisa Fujita, Toshihiro Hanawa, Taisuke Boku, Khaled Z. Ibrahim, "GPU-ready GASNet Implementation on the TCA Proprietary Interconnect Architecture", Proc. of CSCI2016 (Int. Conf. on Computational Science and Computational Intelligence 2016), 6 pages, Las Vegas, Dec. 2016.
5. Akihiro Tabuchi, Yasuyuki Kimura, Sunao Torii, Video Matsufuru, Tadashi Ishikawa, Taisuke Boku, Mitsuhisa Sato, "Design and Preliminary Evaluation of Omni OpenACC Compiler for Massive MIMD Processor PEZY-SC", Proc. of

- IWOMP2016 (International Workshop on OpenMP (LNCS 9903: OpenMP: Memory, Devices, and Tasks), pp.293-305, Nara, Oct. 2016.
6. Kazuya Matsumoto, Norihisa Fujita, Toshihiro Hanawa, Taisuke Boku, "Implementation and Evaluation of NAS Parallel CG Benchmark on GPU Cluster with Proprietary Interconnect TCA", Proc. of VECPAR2016, 8 pages, Porto, Jul. 2016.
  7. Yuta Hirokawa, Taisuke Boku, Shunsuke Sato, Kazuhiro Yabana, "Electron Dynamics Simulation with Time-Dependent Density Functional Theory on Large Scale Symmetric Mode Xeon Phi Cluster", Proc. of PDSEC2016 (in IPDPS2016), 8 pages, Chicago, 2016.
  8. Daichi Mukunoki, Toshiyuki Imamura and Daisuke Takahashi, "Automatic Thread-Block Size Adjustment for Memory-Bound BLAS Kernels on GPUs", Proc. 2016 IEEE 10th International Symposium on Embedded Multicore/Many-core Systems-on-Chip (MCSoc-16), Special Session: Auto-Tuning for Multicore and GPU (ATMG), pp. 377-384, 2016. (DOI: 10.1109/MCSoc.2016.32)
  9. Daisuke Takahashi, "Automatic Tuning of Computation-Communication Overlap for Parallel 1-D FFT", Proc. 2016 IEEE 19th International Conference on Computational Science and Engineering (CSE 2016), pp. 253-256, 2016.
  10. Daisuke Takahashi, "Implementation of Multiple-Precision Floating-Point Arithmetic on Intel Xeon Phi Coprocessors", Proc. 16th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2016), Part II, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 9787, pp. 60-70, 2016. (DOI: 10.1007/978-3-319-42108-7\_5)
  11. Hiroshi Maeda and Daisuke Takahashi, "Parallel Sparse Matrix-Vector Multiplication Using Accelerators", Proc. 16th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2016), Part II, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 9787, pp. 3-18, 2016. (DOI: 10.1007/978-3-319-42108-7\_1)
  12. Yoshihiro Oyama, Jun Murakami, Shun Ishiguro, Osamu Tatebe, "Implementation of a Deduplication Cache Mechanism using Content-Defined Chunking", International Journal of High Performance Computing and Networking, Inderscience, Vol. 9, Issue 3, pp.190-205, 2016 (DOI: <http://dx.doi.org/10.1504/IJHPCN.2016.076251>)

13. Xieming Li and Osamu Tatebe, “Data-Aware Task Dispatching for Batch Queuing System”, IEEE Systems Journal (DOI: 10.1109/JSYST.2015.2471850) (to appear)
14. Yoshihiro Oyama, Shun Ishiguro, Jun Murakami, Shin Sasaki, Ryo Matsumiya, Osamu Tatebe, “Experimental Analysis of Operating System Jitter Caused by Page Reclaim”, The Journal of Supercomputing, Vol. 72, Issue 5, pp.1946-1972, May 2016 (DOI: 10.1007/s11227-016-1703-1)
15. Fuyumasa Takatsu, Kohei Hiraga, Osamu Tatebe, “Design of object storage using OpenNVM for high-performance distributed file system”, Journal of Information Processing, Vol. 24, No. 5, pp.824-833, 2016 (DOI: <http://doi.org/10.2197/ipsjip.24.824>)
16. 渡邊英伸, 黒澤隆, 木村映善, 水原隆道, 村田健史, 建部修見, 広域分散ファイルシステムにおける UDT マルチストリームファイル転送ツール, 電子情報通信学会論文誌 D, Vol.J99-D, No.5, pp.514-525, 2016
17. Xieming Li, Osamu Tatebe, “Improved Data-Aware Task Dispatching for Batch Queuing Systems”, Proceedings of the Seventh International Workshop on Data-Intensive Computing in the Clouds (DataCloud), pp.37-44, 2016
18. Masahiro Tanaka, Osamu Tatebe, “Fault Tolerance of Pwrake Workflow System Supported by Gfarm File System”, Proceedings of 9th Workshop on Many-Task Computing on Clouds, Grids, and Supercomputers (MTAGS), pp.7-12, 2016
19. Fuyumasa Takatsu, Kohei Hiraga, Osamu Tatebe, “PPFS: a Scale-out Distributed File System for Post-Petascale Systems”, Proceedings of IEEE International Conference on Data Science Systems (DSS), pp.1477-1484, 2016
20. 村田直郁, 川島英之, 建部修見. RDMA の適用による RAMP トランザクション処理の高速化. 情報処理学会論文誌データベース. 採録決定.
21. Makoto Yabuta, Anh Viet Nguyen, Shinpei Kato, Masato Eda, Hideyuki Kawashima, Relational Joins on GPUs: A Closer Look. IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems, pp. 1-11, doi: doi:10.1109/TPDS.2017.2677451, 2017.
22. 神谷孝明, 川島英之, 星野喬, 建部修見. 並列ログ先行書き込み手法 P-WAL. 情報処理学会論文誌データベース (TOD) , Vol. 10, No. 1, pp. 24-39, 2017.
23. Li Jiang, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, Efficient Window Aggregate Method on Array Database System, Journal of Information Processing (JIP), Vol. 24, No.6, pp. 867-877, 2016.

24. 川島英之, データ基盤システムの動向, コンピュータソフトウェア, Vol. 33, No. 3 p. 3\_44-3\_49, 2016.
25. 齋藤 周作, 多田野 寛人, 今倉 暁, Shifted Block BiCGSTAB(l)法の構築とその高精度化, 日本応用数理学会論文誌, Vol. 26, No. 3, pp. 318—352, 2016.
26. Hiroto Tadano, Shusaku Saito, Akira Imakura, Accuracy Improvement of the Shifted Block BiCGGR Method for Linear Systems with Multiple Right-Hand Sides, Proc. International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015). (in print)
27. Ryohei Kobayashi, Tomohiro Misono, and Kenji Kise: A High-speed Verilog HDL Simulation Method using a Lightweight Translator, ACM SIGARCH Computer Architecture News - HEART '16 Volume 44 Issue 4, September 2016 Pages 26-31

#### B) 査読無し論文

1. 藤田典久, 大畠佑真, 小林諒平, 山口佳樹, 朴泰祐, "OpenCL と Verilog HDL の混合記述による FPGA プログラミング", 情報処理学会第 158 回 HPC 研究会報告 2017-HPC-158, 2016 年 3 月.
2. 田渕晶, 中尾昌広, 村井均, 朴泰祐, 佐藤三久, "アクセラレータクラスタ向け PGAS 言語 XcalableACC の片側通信機能の実装と評価", 情報処理学会第 158 回 HPC 研究会報告 2017-HPC-158, 2016 年 3 月.
3. 津金佳祐, 田渕晶大, 李珍泌, 村井均, 朴泰祐, 佐藤三久, "KNL メニーコア・プロセッサにおける PGAS 言語 XcalableMP アプリケーションの性能評価", 情報処理学会第 158 回 HPC 研究会報告 2017-HPC-158, 2016 年 3 月.
4. 廣川 祐太, 朴 泰祐, 佐藤 駿丞, 矢花 一浩, "電子動力学コード ARTED による Knights Landing プロセッサの性能評価", 情報処理学会第 157 回 HPC 研究会報告 2016-HPC-157, 2016 年 12 月.
5. 佐藤 賢太, 藤田 典久, 塙 敏博, 朴 泰祐, Ibrahim Khaled, "密結合並列演算加速機構 TCA における複数 DMAC の活用による GPU 対応 GASNet の性能改善", 情報処理学会第 156 回 HPC 研究会報告 2016-HPC-156, 2016 年 9 月.
6. 桑原 悠太, 塙 敏博, 朴 泰祐, "GPU クラスタにおける GPU セルフ MPI システム GMPI の予備性能評価", 情報処理学会第 155 回 HPC 研究会報告 2016-HPC-155 (SWoPP2016), 2016 年 8 月.

7. 田渕晶大, 木村耕行, 鳥居淳, 松古栄夫, 石川正, 朴泰祐, 佐藤三久, "EZY-SC 向け Omni OpenACC コンパイラ的设计・試作", 情報処理学会第 154 回 HPC 研究会報告 2016-HPC-154, 2016 年 4 月.
8. 高橋大介, "SIMD 命令を用いた整数除算の高速化", 日本応用数理学会 2016 年度年会講演予稿集, 2016.
9. 高橋大介, "並列 FFT における通信隠蔽の自動チューニング", 日本応用数理学会 2016 年度年会講演予稿集, 2016.
10. 五味歩武, 高橋大介, "最適化手法を自動化する Xevolver フレームワーク用定義ファイルの実装", 情報処理学会研究報告, Vol. 2016-HPC-155, No. 7, 2016.
11. 高橋大介, "FFT における AT", 2016 年ハイパフォーマンส์コンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2016 論文集, pp. 47-48, 2016.
12. 高橋大介, "並列 FFT における通信隠蔽の自動チューニング", 計算工学講演会論文集, Vol. 21, F-2-1, 2016.
13. 篠塚敬介, 高橋大介, "中心・半径型区間演算に基づく矩形演算を用いた精度保証付き高速フーリエ変換", 情報処理学会研究報告, Vol. 2016-HPC-154, No. 9, 2016.
14. 鷹津冬将, 平賀弘平, 建部修見, 高性能分散ファイルシステムのための分散メタデータサーバ PPMDS の評価, 研究報告ハイパフォーマンส์コンピューティング(HPC), Vol. 2016-HPC-155(1), 11 pages, 2016 年 8 月
15. 田中昌宏, 建部修見, ワークフローシステム Pwrake における耐障害機能, 研究報告ハイパフォーマンส์コンピューティング(HPC), Vol. 2016-HPC-155(11), 7 pages, 2016 年 8 月
16. Mohamed Amin Jabri, Osamu Tatebe, "Performance assessment of highly concurrent sorted linked list with good spatial locality (Unrefereed Workshop Manuscript)", Vol. 2016-HPC-155(35), 4 pages, Aug., 2016
17. 建部修見, Gfarm ファイルシステムの分散メタデータサーバ設計, 研究報告ハイパフォーマンส์コンピューティング(HPC), Vol. 2016-HPC-157(14), 7 pages, 2016 年 12 月
18. 小林淳司, 建部修見, 並列離散イベントシミュレータを用いた分散メタデータサーバの性能評価, 研究報告ハイパフォーマンส์コンピューティング(HPC), Vol. 2017-HPC-158(10), 9 pages, 2017 年 3 月
19. 建部修見, 佐々木慎, 高橋一志, 大山恵弘, Gfarm ファイルシステムにおける RDMA アクセスの設計, 研究報告ハイパフォーマンส์コンピューティング(HPC), Vol. 2017-HPC-158(12), 6 pages, 2017 年 3 月

20. 岩井厚樹, 建部修見, 田中昌宏, 並列ベンチマークのための同期複数タスク実行フレームワークの設計, 研究報告ハイパフォーマンスコМПユーティング (HPC), Vol. 2017-HPC-158(34), 8 pages, 2017 年 3 月
21. 中村泰大, 川島英之, 建部修見, 並行実行制御手法 TicToc と並列ログ先行書き込み手法 P-WAL の結合, 情報処理学会第 139 回 OS 研究会, アクロス福岡, 2017 年 3 月 2 日.
22. 神谷孝明, 星野喬, 川島英之, 建部修見, トランザクション処理システムのリカバリ可能性の再考, 情報処理学会第 139 回 OS 研究会, アクロス福岡, 2017 年 3 月 2 日.
23. 川島英之, 建部修見, 並列データベースシステムにおける演算子間データ配送方式の検討, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム (OS), Vol.2016-OS-138(2), No. 2016-08-01, pp. 1-5.
24. 村田直郁, 川島英之, 建部修見, RDMA を用いた RAMP トランザクションの高速化, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム(OS), Vol. 2016-OS-137(8), No. 2016-05-23, pp. 1-11.
25. 神谷孝明, 川島英之, 建部修見, 並列 WAL における共有カウンタの競合緩和化, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム(OS), Vol. 2016-OS-137(7), No. 2016-05-23, pp. 1-11.
26. 大黒晴之, 川島英之, 建部修見, In-memory MapReduce における最適な Shuffle 手法の検討, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム(OS), Vol.2016-OS-137(6), No. 2016-05-23, pp. 1-10.
27. 瀧沢亮太, 川島英之, 建部修見, データ移動方式による PostgreSQL への結合演算実装の試み, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム(OS), Vol.2016-OS-137(3), No. 2016-05-23, pp. 1-7.
28. 川島英之, 建部修見, 演算子間データ配送方式の検討, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム(OS), Vol. 2016-OS-137(1), No. 2016-05-23, pp.1-6.

## (2) 国際会議発表

### A) 招待講演

1. Taisuke Boku, "HPC Status in Japan", BDEC Workshop in ISC2016, Frankfurt Messe Jun 23rd, 2016.
2. Taisuke Boku, "Netxt Generation Interconnection for Accelerated Computing", ExaCOMM 2016 Workshop at ISC2016, Frankfurt Messe, Jun. 23rd, 2016.

3. Taisuke Boku, "FPGA Offloading on Computational Astrophysics and inter-FPGA communication", FPGA Workshop 2016, NCSA, Urbana Champaign, Oct. 13th, 2016.
4. Taisuke Boku, "Parallel Multi-Hetero System for Next Generation Computational Sciences", CODESIGN Workshop 2016 at HPC China 2016, Xian, Oct. 28th, 2016.
5. Taisuke Boku, "Codesigning for New Frontier of Computational Sciences", RECS2016 Workshop, Tokyo, Nov. 30th, 2016.
6. Taisuke Boku, "University of Tsukuba's Accelerated Computing", 3rd ADAC Symposium, Kashiwa, Jan. 25th, 2017.
7. Taisuke Boku, "Multi-Hybrid Platform for Next Generation Computational Science", AICS Symposium 2017, Kobe, Feb. 23rd, 2017.
8. Taisuke Boku, "Japan's Supercomputing Systems on Today and Tomorrow", HPC Saudi Arabia 2017, Jeddah, Mar. 14th, 2017.
9. Ryohei Kobayashi, "A survey of how to efficiently implement application-specific hardware on an FPGA", FPGA Workshop 2016, NCSA, Urbana Champaign, Oct. 12th, 2016.

#### B) 一般講演

1. Kenta Sato, Norihisa Fujita, Toshihiro Hanawa, Taisuke Boku, Khaled Z. Ibrahim, "GPU-ready GASNet Implementation on the TCA Proprietary Interconnect Architecture", Proc. of CSCI2016 (Int. Conf. on Computational Science and Computational Intelligence 2016), 6 pages, Las Vegas, Dec. 2016.
2. Akihiro Tabuchi, Yasuyuki Kimura, Sunao Torii, Video Matsufuru, Tadashi Ishikawa, Taisuke Boku, Mitsuhisa Sato, "Design and Preliminary Evaluation of Omni OpenACC Compiler for Massive MIMD Processor PEZY-SC", Proc. of IWOMP2016 (International Workshop on OpenMP (LNCS 9903: OpenMP: Memory, Devices, and Tasks), pp.293-305, Nara, Oct. 2016.
3. Kazuya Matsumoto, Norihisa Fujita, Toshihiro Hanawa, Taisuke Boku, "Implementation and Evaluation of NAS Parallel CG Benchmark on GPU Cluster with Proprietary Interconnect TCA", Proc. of VECPAR2016, 8 pages, Porto, Jul. 2016.
4. Yuta Hirokawa, Taisuke Boku, Shunsuke Sato, Kazuhiro Yabana, "Electron Dynamics Simulation with Time-Dependent Density Functional Theory on Large



- Scale Symmetric Mode Xeon Phi Cluster", Proc. of PDSEC2016 (in IPDPS2016), 8 pages, Chicago, 2016.
5. Daisuke Takahashi, "Automatic Tuning for Parallel FFTs on Cluster of Intel Xeon Phi processors", 2017 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance and Scientific Computing (2017 ATAT in HPSC), Taipei, Taiwan, March 10, 2017.
  6. Daichi Mukunoki, Toshiyuki Imamura and Daisuke Takahashi, "Implementation Techniques for High Performance BLAS Kernels on Modern GPUs", SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE17), Atlanta, Georgia, USA, February 28, 2017.
  7. Daisuke Takahashi, "Implementation of Parallel FFTs on Knights Landing Cluster", SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE17), Atlanta, Georgia, USA, February 28, 2017.
  8. Daichi Mukunoki, Toshiyuki Imamura and Daisuke Takahashi, "Automatic Thread-Block Size Adjustment for Memory-Bound BLAS Kernels on GPUs", 2016 IEEE 10th International Symposium on Embedded Multicore/Many-core Systems-on-Chip (MCSoc-16), Special Session: Auto-Tuning for Multicore and GPU (ATMG), Lyon, France, September 22, 2016.
  9. Daisuke Takahashi, "Automatic Tuning of Computation-Communication Overlap for Parallel 1-D FFT", 2016 IEEE 19th International Conference on Computational Science and Engineering (CSE 2016), Paris, France, August 24, 2016.
  10. Daisuke Takahashi, "Implementation of Multiple-Precision Floating-Point Arithmetic on Intel Xeon Phi Coprocessors", 16th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2016), Beijing, China, July 4, 2016.
  11. Hiroshi Maeda and Daisuke Takahashi, "Parallel Sparse Matrix-Vector Multiplication Using Accelerators", 16th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2016), Beijing, China, July 4, 2016.
  12. Daisuke Takahashi, "Automatic Tuning for Parallel FFTs on Intel Xeon Phi Clusters", SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP16), Paris, France, April 14, 2016.

13. Junji Kobayashi, Osamu Tatebe, “Simulation study of distributed metadata server”, 2nd Summer of CODES Workshop, Argonne, Jul. 12, 2016
14. Osamu Tatebe, “Data Integrity support for Silent Data Corruption in Gfarm File System”, Storage Developer Conference, Santa Clara, Sep. 19, 2016
15. Xieming Li, Osamu Tatebe, "Improved Data-Aware Task Dispatching for Batch Queuing Systems", the Seventh International Workshop on Data-Intensive Computing in the Clouds (DataCloud), Salt Lake City, Nov. 14, 2016
16. Masahiro Tanaka, Osamu Tatebe, "Fault Tolerance of Pwrake Workflow System Supported by Gfarm File System", Proceedings of 9th Workshop on Many-Task Computing on Clouds, Grids, and Supercomputers (MTAGS), Salt Lake City, Nov. 14, 2016
17. Fuyumasa Takatsu, Kohei Hiraga, Osamu Tatebe, “PPFS: a Scale-out Distributed File System for Post-Petascale Systems”, Proceedings of IEEE International Conference on Data Science Systems (DSS), Sydney, Dec. 12, 2016
18. Naofumi Murata, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, Accelerating Read Atomic Multi-partition Transaction with Remote Direct Memory Access, IEEE International Conference on Big Data and Smart Computing, pp. 239-246, 2017. Best paper award on big data processing (runners-up).
19. Kentaro Horio, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, Efficient Parallel Summation on Encrypted Database System, IEEE International Conference on Big Data and Smart Computing, pp. 178-185, 2017. (acceptance ratio = 25%).
20. Ryuya Mitsuhashi, Hideyuki Kawashima, Takahiro Nishimichi, Osamu Tatebe, Three-Dimensional Spatial Join Count exploiting CPU Optimized STR R-Tree, Workshop of Big Data Challenges, Research, and Technologies in the Earth and Planetary Sciences held as part of the IEEE Big Data Conference, pp. 2938-2947, 2016.
21. Li Jiang, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, Fast Window Aggregate on Array Database by Recursive Incremental Computation, The IEEE 12th International Conference on eScience, pp. 101-110, 2016.
22. Harunobu Daikoku, Hideyuki Kawashima, Osamu Tatebe, On Exploring Efficient Shuffle Design for In-Memory MapReduce. BeyondMR workshop, Article 6, 2016..
23. Hiroto Tadano, Ryosaku Ikeda, Hiroyuki Kusaka, “Speeding up Large Eddy Simulation by Multigrid preconditioned Krylov subspace methods with mixed

precision”, The 35<sup>th</sup> JSST Annual Conference International Conference on Simulation Technology (JSST2016), Kyoto, Japan, Oct. 27, 2016

24. Hiroto Tadano, “Numerical investigation of the cause of accuracy degradation of approximate solutions generated by Shifted Block Krylov subspace methods”, The 1<sup>st</sup> Japan-Thailand Workshop on Numerical and Experimental Approaches to Nonlinear Problems, Bangkok, Thailand, Dec. 9, 2016.
25. Ryohei Kobayashi, Tomohiro Misono, and Kenji Kise: A High-speed Verilog HDL Simulation Method using a Lightweight Translator, International Symposium on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART 2016), July 2016

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

1. 朴泰祐, "Performance evaluation of electron dynamics simulation code ARTED on KNL cluster Oakforest-PACS", CDMSI シンポジウム, 柏, Dec. 6th, 2016.

#### B) その他の発表

1. 佐藤賢太, “密結合並列演算加速機構 TCA による GPU 対応 GASNet の実装と評価”, 情報処理学会 HPCS2016, 仙台, 2016/6/7
2. 廣川祐太, “電子動力学シミュレーションのステンシル計算に対するメニーコアプロセッサ向け最適化”, 情報処理学会 HPCS2016, 仙台, 2016/6/6
3. 田渕晶大, “PEZY-SC 向け Omni OpenACC コンパイラの設計・試作”, 情報処理学会第 154 回 HPC 研究会, 横浜, 2016/4/25
4. 桑原悠太, “GPU クラスタにおける GPU セルフ MPI システム GMPI の予備性能評価”, 情報処理学会第 155 回 HPC 研究会, 松本, 2016/8/8
5. 佐藤賢太, “密結合並列演算加速機構 TCA における複数 DMAC の活用による GPU 対応 GASNet の性能改善”, 情報処理学会第 156 回 HPC 研究会, 小樽, 2016/9/15
6. 廣川祐太, “電子動力学コード ARTED による Knights Landing プロセッサの性能評価”, 情報処理学会第 157 回 HPC 研究会, 沖縄, 2016/12/21
7. 藤田典久, “OpenCL と Verilog HDL の混合記述による FPGA プログラミング”, 情報処理学会第 158 回 HPC 研究会, 熱海, 2017/3/9
8. 田渕晶, “アクセラレータクラスタ向け PGAS 言語 XcalableACC の片側通信機能の実装と評価”, 情報処理学会第 158 回 HPC 研究会, 熱海, 2016 年 3 月.

9. 津金佳祐, “KNL メニーコア・プロセッサにおける PGAS 言語 XcalableMP アプリケーションの性能評価”, 情報処理学会第 158 回 HPC 研究会, 熱海, 2016 年 3 月.
10. 高橋大介, “SIMD 命令を用いた整数除算の高速化”, 日本応用数理学会 2016 年度年会, 北九州, 2016 年 9 月 12 日.
11. 高橋大介, “並列 FFT における通信隠蔽の自動チューニング”, 日本応用数理学会 2016 年度年会, 北九州, 2016 年 9 月 12 日.
12. 五味歩武, “最適化手法を自動化する Xevolver フレームワーク用定義ファイルの実装”, 情報処理学会第 155 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究発表会, 松本, 2016 年 8 月 8 日.
13. 高橋大介, “FFT における AT”, 2016 年ハイパフォーマンส์コンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2016, 仙台, 2016 年 6 月 6 日.
14. 高橋大介, “並列 FFT における通信隠蔽の自動チューニング”, 第 21 回計算工学講演会, 新潟, 2016 年 5 月 31 日.
15. 篠塚敬介, “中心-半径型区間演算に基づく矩形演算を用いた精度保証付き高速フーリエ変換”, 情報処理学会第 154 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究発表会, 横浜, 2016 年 4 月 25 日.
16. 鷹津冬将, “高性能分散ファイルシステムのための分散メタデータサーバ PPMDS の評価”, 第 155 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究発表会, 松本, 2016 年 8 月 8 日.
17. 田中昌宏, “ワークフローシステム Pwrake における耐障害機能”, 第 155 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究発表会, 松本, 2016 年 8 月 8 日.
18. Mohamed Amin Jabri, “Performance assessment of highly concurrent sorted linked list with good spatial locality (Unrefereed Workshop Manuscript)”, 155th IPSJ SIGHPC Meeting, Matsumoto, Aug. 10, 2016
19. 建部修見, “Gfarm ファイルシステムの分散メタデータサーバ設計”, 第 157 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究発表会, 那覇, 2016 年 12 月 22 日.
20. 小林淳司, “並列離散イベントシミュレータを用いた分散メタデータサーバの性能評価”, 第 158 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究発表会, 熱海, 2017 年 3 月 8 日.
21. 建部修見, “Gfarm ファイルシステムにおける RDMA アクセスの設計”, 第 158 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究発表会, 熱海, 2017 年 3 月 8 日.
22. 岩井厚樹, “並列ベンチマークのための同期複数タスク実行フレームワークの設計”, 第 158 回ハイパフォーマンส์コンピューティング研究発表会, 熱海, 2017 年 3 月 10 日.

23. 渡辺敬之, “並行実行木 Masstree の調査”, 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム, 2017 年 3 月 6 日.
24. 中村泰大, “並行実行制御手法 TicToc の調査”, 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム, 2017 年 3 月 6 日.
25. 梶原顕伍, “分散合意手法 Raft の調査”, 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム, 2017 年 3 月 6 日.
26. 渡辺敬之, “並行実行木 Masstree の一括構築法”, 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム, 2017 年 3 月 6 日.
27. 中村泰大, “並行実行制御手法 TicToc と並列ログ先行書き込み手法 P-WAL の結合”, 情報処理学会第 139 回 OS 研究会, アクロス福岡, 2017 年 3 月 2 日.
28. 神谷孝明, “トランザクション処理システムのリカバリ可能性の再考”, 情報処理学会第 139 回 OS 研究会, アクロス福岡, 2017 年 3 月 2 日.
29. 川島英之, “並列データベースシステムにおける演算子間データ配送方式の検討”, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム( OS ), Vol.2016-OS-138(2), No. 2016-08-01, pp. 1-5.
30. 村田直郁, “RDMA を用いた RAMP トランザクションの高速化”, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム( OS ), Vol. 2016-OS-137(8), No. 2016-05-23, pp. 1-11.
31. 神谷孝明, “並列 WAL における共有カウンタの競合緩和化”, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム( OS ), Vol. 2016-OS-137(7), No. 2016-05-23, pp. 1-11.
32. 大黒晴之, “In-memory MapReduce における最適な Shuffle 手法の検討”, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム(OS), Vol.2016-OS-137(6), No. 2016-05-23, pp. 1-10.
33. 瀧沢亮太, “データ移動方式による PostgreSQL への結合演算実装の試み”, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム(OS), Vol.2016-OS-137(3), No. 2016-05-23, pp. 1-7.
34. 川島英之, “演算子間データ配送方式の検討”, 情報処理学会研究報告システムソフトウェアとオペレーティング・システム(OS), Vol. 2016-OS-137(1), No. 2016-05-23, pp.1-6.
35. 多田野 寛人, “精度混合マルチグリッド前処理による Large Eddy Simulation の高速化”, 2016 年度【非線形問題の解法に関する研究会】第 1 回非線形・可視化部門研究会, 自然科学研究機構核融合科学研究所, 2016 年 8 月 1 日.

#### (4) 著書、解説記事等

1. 小林諒平: 緊急特集 本家 ARM の IoT ワールド入門 計算力時代到来...スパコン技術  
研究コーナ ソート専用コンピュータ最前線, CQ 出版社 Interface 2017 年 2 月号,  
pp.163-167, February 2017.
2. 小林諒平: IoT&スパコン! ラズパイ時代の自分用コンピュータ作り 第 6 章 ビッグ  
データ時代にますます重要! ハードウェア・データ処理に挑戦, CQ 出版社 Interface  
2016 年 12 月号, pp.72-77, December 2016.
3. 小林諒平: IoT&スパコン! ラズパイ時代の自分用コンピュータ作り 第 6 章  
Appendix 2 基本演算の高速化が重要! ハードウェア並列ソート・アルゴリズム, CQ  
出版社 Interface 2016 年 12 月号, pp.78-84, December 2016.

#### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 朴泰祐: 日独仏・三ヶ国国際共同研究 SPPEXA (JST-CREST 内で実施) “MUST  
Correctness Checking for YML and XMP Programs”, 2015-2017,

#### 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. 第 1 回エクストリームストレージ研究会, 東京, 2016 年 5 月 23 日
2. 第 2 回エクストリームストレージ研究会, 東京, 2016 年 6 月 30 日
3. 第 3 回エクストリームストレージ研究会, 東京, 2016 年 8 月 3 日
4. 第 4 回エクストリームストレージ研究会, 東京, 2016 年 10 月 5 日
5. Gfarm ワークショップ 2016, 神戸, 2016 年 10 月 21 日
6. 第 5 回エクストリームストレージ研究会, 東京, 2016 年 11 月 4 日
7. Gfarm シンポジウム 2016, 東京, 2016 年 12 月 9 日
8. 第 6 回エクストリームストレージ研究会, 東京, 2017 年 1 月 12 日
9. 第 7 回エクストリームストレージ研究会, 東京, 2017 年 3 月 21 日

#### 9. 管理・運営

組織運営や支援業務の委員・役員の実績

1. 朴泰祐: 筑波大学システム情報系人事委員会委員

2. 朴泰祐：筑波大学情報環境企画室会議委員
3. 朴泰祐：HPCI 連携サービス委員会副委員長
4. 朴泰祐：学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）運営委員
5. 朴泰祐：理化学研究所客員主管研究員
6. 高橋大介：筑波大学情報環境機構学術情報メディアセンター運営委員会委員
7. 高橋大介：理化学研究所客員主管研究員
8. 高橋大介：HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
9. 建部修見：HPCI 連携サービス運営・作業部会委員
10. 建部修見：理化学研究所客員主管研究員
11. 建部修見：情報通信研究機構協力研究員
12. 建部修見：HPCI 利用研究課題審査委員会レビューアー
13. 建部修見：学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）課題審査委員
14. 建部修見：東京工業大学学術国際情報センター共同利用専門委員
15. 建部修見：特定非営利団体つくば OSS 技術支援センター理事長
16. 建部修見：SNIA 日本支部エクストリームストレージ研究会研究会長
17. 建部修見：情報処理学会ハイパフォーマンスコピューティング研究会運営委員

## 10. 社会貢献・国際貢献

1. Taisuke Boku: Steering Committee Chair, HPC Asia Conferene Series
2. Taisuke Boku: Organizing Chair, HPC in Asia Session, ISC2016, Frankfurt
3. Taisuke Boku: Steering Committee, ISC2016
4. Taisuke Boku: Program Committee, Emergin Technology Session, SC2016
5. Taisuke Boku: Program Committee, ExaComm2016 International Workshop (ISC2016)
6. Taisuke Boku: Program Committee, Europar2016
7. Taisuke Boku: Program Committee, HiPC2016
8. Taisuke Boku: Program Committee, IWOMP2016
9. Daisuke Takahashi: Program Committee, 16th IEEE International Conference on Computer and Information Technology (CIT 2016)
10. Daisuke Takahashi: Program Committee, First International Workshop on GPU Computing and Applications (GCA'16) in Conjunction with 4th International Symposium on Computing and Networking (CANDAR'16)

11. Daisuke Takahashi: Program Committee, Special Session on Auto-Tuning for Multicore and GPU (ATMG) in Conjunction with IEEE 10th International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoc-16)
12. Daisuke Takahashi: Program Committee, 1st GPU Technology Workshop (GPUTech 2016) in Conjunction with the 16th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2016)
13. Daisuke Takahashi: Program Committee, 16th International Conference on Algorithms and Architectures for Parallel Processing (ICA3PP 2016)
14. Daisuke Takahashi: Program Committee, IEEE 10th International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoc-16)
15. Daisuke Takahashi: Program Committee, Eleventh International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT 2016)
16. Daisuke Takahashi: Program Committee, International Conference on Computational Science (ICCS 2016)
17. 高橋大介：情報処理学会論文誌コンピューティングシステム編集委員
18. 高橋大介：情報処理学会ハイパフォーマンスクンピューティング研究会運営委員
19. Osamu Tatebe: Program Committee, 25th ACM International Symposium on High-Performance Parallel and Distributed Computing (HPDC) 2016
20. Osamu Tatebe: Program Committee, 16th IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid) 2016
21. Osamu Tatebe: Program Committee, IEEE International Conference on Cluster Computing (Cluster) 2016
22. Osamu Tatebe: Program Committee, 8th IEEE International Conference on Cloud Computing Technology and Science (CloudCom) 2016
23. Osamu Tatebe: Program Committee, International Supercomputing Conference (ISC) 2016
24. Osamu Tatebe: Program Track Chair, Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure (ACSI) 2016
25. Osamu Tatebe: Program Committee, 6th International Workshop on Advances in High-Performance Computational Earth Sciences: Applications & Frameworks (IHPCES) 2016
26. Hideyuki Kawashima: Program Committee, IEEE International Symposium on Embedded Multicore/Many-core Systems-on-Chip (MCSoc-16)



27. Hideyuki Kawashima: Program Committee, 2016 IEEE/WIC/ACM International Conference on Web Intelligence (WI'16)
28. Hideyuki Kawashima: Program Committee, International Workshop on Smart Sensing Systems (IWSSS '16)
29. 川島英之: プログラム副委員長、xSIG (cross-disciplinary workshop on computing Systems, Infrastructures, and programminG)
30. 川島英之: 情報処理学会データベースシステム研究会運営委員
31. 川島英之: 情報処理学会システムソフトウェアとオペレーティングシステム研究会運営委員
32. 川島英之: 電子情報通信学会知的環境とセンサネットワーク研究会運営委員
33. 川島英之: 情報処理学会論文誌データベース編集委員
34. 川島英之: 電子情報通信学会論文誌査読委員
35. 川島英之: 電子情報通信学会英文論文誌小特集号編集委員
36. 多田野寛人: 日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 主査
37. 多田野寛人: 日本応用数理学会「若手の会」研究部会 運営委員
38. 多田野寛人: 日本応用数理学会 JSIAM Letters 編集委員
39. 多田野寛人: 2017 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2017) プログラム委員

## 11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

## VIII. 計算情報学研究部門

### VIII-1. データ基盤分野

#### 1. メンバー

教授	北川 博之
准教授	天笠 俊之
助教	塩川 浩昭
研究員	Salman Ahmed Shaikh, 駒水 孝裕
学生	大学院生 24 名、学類生 6 名、研究生 2 名

#### 2. 概要

計算科学において、大規模データの管理や活用は極めて重要な課題となっている。計算情報学研究部門データ基盤分野は、データ工学関連分野の研究開発を担当している。具体的には、異種データベースや多様な情報源を統合的に扱うための情報統合基盤技術、データ中に埋もれた知識や規則を発見するためのデータマイニング・知識発見技術、インターネット環境において様々なデータを統合的に扱うための XML 関連技術等の研究を継続して行っている。また、国際睡眠医科学統合機構(IIS)等との連携を通じて、計算科学の各分野における応用的な研究を推進している。

#### 3. 研究成果

##### 【1】 情報統合基盤技術

(関連研究費：文科省／理研受託研究，NICT 受託研究，科研費・基盤研究(B))

##### (1) Approximate StreamOLAP

多くの組織において、ストリームデータをリアルタイムに詳細に分析したいという要求が出てきている。OLAP (OnLine Analytical Processing) は静的なデータの分析に最もよく使われる分析手法の一つである。ストリームデータに対して OLAP 分析を適用するには、データをすべてメモリ上にロードしなければならない、サイズが確定的でないストリームを扱うのは現実的ではない。これに対して、本研究ではストリームデータを二次記憶に保存しつつ、分析に必要なデータをコンパクトな形式で保存し、OLAP 分析を可能にするためのシステムである Approximate OLAP (AOLAP) を提案した。

AOLAP では Piece-wise Linear Approximation (PLA) を用いて永続化された分析要求ごとに数値の取りうる傾向を圧縮して保持する。PLA は数値列のデータを一定区間ごとに一つの線形関数で表現する技術である。数値データ列を線形関数で置き換え、誤差が小さくなるように学習する。また、誤差が一定以上大きくなった場合は、大きくなった次点から新たな線形関数を推定する。これにより、値そのものを覚えるよりも少ない情報で数値データを近似できる。例えば、以下のような例を考える。この例では、データは(時刻, 商品, 店舗, プロモーション, 販売数)の五つ組で表現される商品の購買情報である。

$(1, p_1, s_1, m_1, 48), (1, p_2, s_1, m_1, 48), (2, p_1, s_1, m_1, 43), (2, p_2, s_1, m_1, 64), (3, p_1, s_1, m_1, 60), (3, p_2, s_1, m_1, 73), (4, p_1, s_1, m_1, 75), (4, p_2, s_1, m_1, 58), (5, p_1, s_1, m_1, 35), (5, p_2, s_1, m_1, 87), (6, p_1, s_1, m_1, 52), (6, p_2, s_1, m_1, 7), (7, p_1, s_1, m_1, 95), (7, p_2, s_1, m_1, 2), \dots$

このとき、販売数を PLA を用いて関数表現に圧縮することを考える．ある商品  $p_1$  のある店舗  $s_1$  におけるあるプロモーション  $m_1$  に対する販売数は図 1 のように近似することができる．推定した関数と実際の値との乖離が大きくなった次点で、新たな関数に切り替わる．そのため、図 1 では時刻 1-4 までで一つの関数、時刻 5-7 で別な関数となっている．

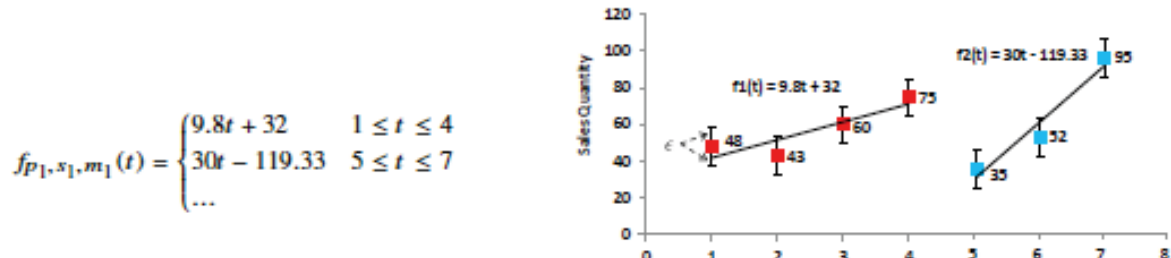


図 1 PLA を用いた関数表現による圧縮の例

PLA を用いた提案手法は空間コストを下げる反面分析結果にエラーを含めてしまうというトレードオフの関係を持つ．これに対して、誤差を最小にする PLA の誤差を検出する最適化を施すことで解決を図った．実験的にもエラーが抑えられており、空間コストも下げることに成功した．

## (2) バッチ処理とストリーム処理の融合するフレームワーク JsFlow

ビッグデータ処理のアプローチとして、データを蓄えて一括で処理する方式（バッチ処理）とデータを継続的に処理する方式（ストリームデータ処理）が一般的に利用されている．特に近年では、データ利活用の高度化に伴い、バッチ処理とストリーム処理の両方を統合的に利用して、複雑な分析処理やサービス提供を行う機会が増加している．例えば、あるニュースサイトに掲載されたニュース記事から主要なトピックを抽出し、トピック関連の深い Twitter のツイートデータを収集するようなサービスを考えた場合、ニュース記事からトピックを抽出する処理にはバッチ処理を利用し、トピックに関連のあるツイートデータを収集する処理はストリーム処理を用いるのが適切である．この例に限らず、バッチ処理とストリーム処理を融合して利用する例は我々の身のまわりに増加している状況にある．

本研究では、上述したバッチ処理とストリーム処理を融合したアプリケーションを容易に開発可能とする分散処理フレームワーク JsFlow を開発した．一般的に、バッチ処理とストリーム処理ではデータモデルやデータ処理方式が大きく異なる．ゆえに、サービス開発者・サービス提供者は、バッチ処理とストリーム処理の様々なモデルや実装の違いを熟知した上でアプリケーションを構築する必要があり、開発コストが大きいという問題が知られている．この問題に対して JsFlow では、バッチ処理基盤とストリーム処理基盤の上に、両方を抽象化するフレームワークを提供する．JsFlow はフレームワーク内において(1)バッチ処理とストリーム処理を統一的に扱うための処理記述法と(2)アプリケーションの実行効率を引き出すための処理方式自動選択手法を導入することで、アプリケーション開発が容易なデータ処理基盤を提供する．

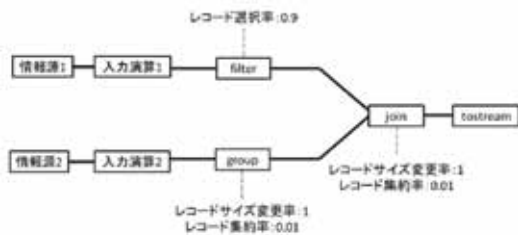


図 2 実験に用いた Task

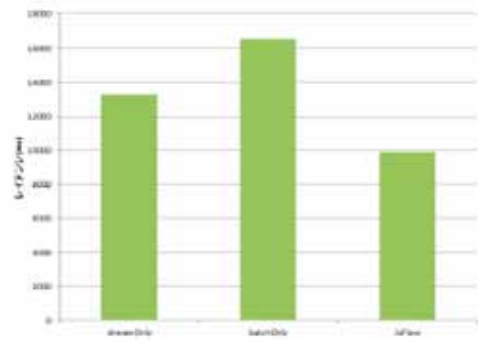


図 3 実行時間の比較

表 1 実験設定

Task 数	入力演算子 1	ウィンドウ長 1	実行間隔 1	入力演算子 2	ウィンドウ長 2	実行間隔 2
Task 1	window	10 minutes	1 minute	read	100K records	once
Task 2	window	100 seconds	10 seconds	read	100K records	once
Task 3	window	10 minutes	1 minute	read	6M records	once
Task 4	window	100 seconds	10 seconds	read	6M records	once
Task 5	window	10 minutes	1 minute	window	10 minutes	1 minute
Task 6	window	100 seconds	10 seconds	window	10 minutes	1 minute
Task 7	window	10 minutes	10 minutes	window	100 seconds	10 seconds
Task 8	window	100 seconds	100 seconds	window	100 seconds	10 seconds

本年度は予備的な評価のために、Apache Flink を用いて JsFlow のプロトタイプシステムを構築し、図 2、図 3 に結果を示した通り、全ての Task をバッチ処理もしくはストリーム処理として登録した場合と比較して、JsFlow はより短い計算時間で処理を実行できていることがわかる。これにより、バッチ処理やストリーム処理を融合的に扱う分析処理やアプリケーションにおいて、提案手法 JsFlow が性能的に優位であることを確認した。

## 【2】 データマイニング・知識発見技術

(関連研究費：文科省／理研受託研究，NICT 受託研究，科研費・研究活動スタート支援)

### 1. 大規模グラフクラスタリングの高速化

大規模なグラフに対する高速な分析手法の構築に関して、本年度は (1-A)分散並列計算のための高速なグラフ分割手法、および、(1-B)構造的類似度に基づくクラスタリングの超並列化手法を開発した。

#### (1-A) 分散並列計算のための高速なグラフ分割手法

複数台の計算機を用いた分散グラフ処理は大規模グラフ分析の重要な要素技術である。分散グラフ処理ではひとつのグラフを分割し複数の計算機上に割り当てることで並列に分析処理を行うが、このグラフ分割の品質によって分析処理の性能は大きく左右される。具体的には、グラフを  $k$  個の部分グラフに分割する際に、各部分グラフに含まれるノード（またはエッジ）数を均一に保ちつつ、部分グラフを横断するエッジ(edge-cut)数を最小化することが分散グラフ処理の性能向上において重要となる。

本研究では上記の課題を解決するために、グラフ分割手法 Balanced Graph Partitioning (BGP)を開発した。BGP は実世界のグラフにおいて 3 部クリーク構造が頻出するという構造特性に着眼し、3 部クリーク構造を逐次的に集約しながら、組合せ最適化手法 First-Fit 法を

実行することで、各部分グラフのノード（エッジ）数を均一化と edge-cut 数の削減を同時に実現する。BGP を分散グラフ処理フレームワーク PowerGraph に実装し性能比較を行った結果、従来最も高い性能を示した HDRF 法と比較して、分散グラフ分析処理を 3.2 倍以上高速化できることを確認した。本研究成果を用いることにより計算機の持つ計算性能を十分に引き出した効率的な分散グラフ処理が可能となる。

### (1-B) 構造的類似度に基づくクラスタリングの並列化

グラフクラスタリングはグラフの中に存在するコミュニティ構造を理解する上で重要な要素技術である。その中でも構造的類似度に基づくクラスタリング手法 SCAN は高い精度でクラスタを検出することが出来ることから幅広いアプリケーションで利用されている。しかしながら、SCAN はグラフに含まれる全てのノードとエッジに対して構造的類似度計算を行う必要があり、大規模なグラフを対象とした場合に計算量が爆発するという問題がある。この問題を解決するために、これまでいくつかの高速化手法が提案されてきたが、Web や SNS などの 1 億ノード規模の大規模なグラフは処理できないのが現状である。

本研究では、計算科学研究センターが運用するスーパーコンピュータ COMA および Oakforest-PACS に搭載されている Intel Xeon Phi Co-processor を活用した SCAN の超並列化手法 SCAN-XP を開発した。SCAN-XP では、実世界に存在するグラフには次数分布の偏りや 3 部クリーク構造が頻出するといった構造特性を持つことに着眼し、(i) 実世界のグラフの構造特性による並列化性能向上のボトルネックを解消するデータレイアウトを与えると同時に、(ii) Intel Xeon Phi Co-processor の持つ多くの物理コアと 512 ビット SIMD 演算を最大限に活用するためのアルゴリズムの最適化を行った。性能評価のために大規模な実データを用いた実験を実施し、提案手法 SCAN-XP は既存手法である SCAN と比較して、分析時間が 100 倍以上高速化されていることを確認した。また、1 億ノード規模のグラフに対するクラスタリングも、SCAN-XP を用いることで 30 秒程度の時間で実行することが可能であり、この処理性能は我々が知る限り世界最高性能である。

## 2. マイクロブログにおけるメタデータ推定

ソーシャルメディアは今日重要な情報源であり、ソーシャルメディアデータに対するメタデータの推定・付与は、異種データの連携に極めて有用である。例えば、ソーシャルメディアユーザの居住地を推定できれば、ソーシャルメディアとニュースメディア等のデータとを統合することで、実世界のどこでどのようなニュースが注目されているかなどが分かる。

前年度は主にソーシャルメディアにおけるユーザ間のつながりを表すグラフ構造を用いたノード分類アルゴリズムに取り組んだが、本年度は指定したメタデータに合致するソーシャルメディアデータを、限られた資源のみを用いて効率的に収集するという問題に取り組んだ。時間や計算資源などは現実的に限られているため、その限られた資源の中で所望のデータをできるだけ多く収集することが重要である。では、限られた時間（例えば 1 週間）内において、とある地域から発信されたソーシャルメディアコンテンツを出来る限り多く収集するにはどのようにすれば良いだろうか。本研究では、限られた資源（時間や API アクセス回数など）のみを用いて、指定された地域から発信されたツイート（投稿）をできるだけ多く収集する手法を提案した。特定の地域からのツイートを多く集めると、災害の検知や状況把握などが行えることは広く知られている。しかし、多くのツイートの発信地は非公開であるため、これらの目的を達成するためには発信地を推定することが重要である。

我々の着眼点は、この問題をバンディット問題としてモデル化することである。バンディット問題はスロットマシンを例として説明されることが多い。それぞれ当たる確率が異なるスロットマシンがいくつかある状況を考える。このとき、手持ちのお金を最大にするにはど

のようにスロットマシンをプレイすれば良いだろうか．まず，プレイヤーは手当たり次第スロットマシンをプレイして，当たる確率の大きいスロットマシンを見つけなくてはならない（探索）．同時に，プレイヤーはお金を最大に増やすために，これまでに見つかった当たる確率の大きいスロットマシンをできるだけ多くプレイする必要がある（活用）．限られた資源（お金）の中で最大の報酬を得るためには，この探索と活用のトレードオフを最適化しなくてはならない．この問題をバンディット問題と呼ぶ．特定の地域から発信されたツイートを多く集めるという問題では，限られた資源（時間）のなかで，高い確率で特定地域からツイートを発信するユーザを発見し（探索），高い確率を持つユーザからのツイートをできるだけ優先して収集する（活用）必要がある．

提案手法は， $\epsilon$ -greedy アルゴリズムと呼ばれる，バンディット問題を解くアルゴリズムの一つを採用する．このアルゴリズムは，ある一定の確率（ $\epsilon$ ）で完全にランダムにユーザを選択し，ツイートを収集する（探索）と同時に，確率（ $1 - \epsilon$ ）で，これまでの履歴から計算された，特定地域から多くのツイートを発信するユーザを選択する．これにより，提案手法は探索と活用のトレードオフを出来る限り最適化し，多くの所望のツイートを収集する．

実施した評価実験について述べる．本実験では提案手法とバンディットアルゴリズムを用いない手法とを比較した．実験結果を図 4 に示す．各グラフは異なる地域（東京，京都，横浜，つくば）における実験結果を表す．各棒は各手法による結果を表し，縦軸が各手法によって最終的に収集された所望のツイートの数を表す．また，エラーバーは結果の標準偏差を表す．実験結果によると，すべての結果において，提案手法（左）が最も多く対象地域からのツイートを収集できていることが分かる．これは，バンディット問題としてのモデル化が有効であることを示している結果であると言える．

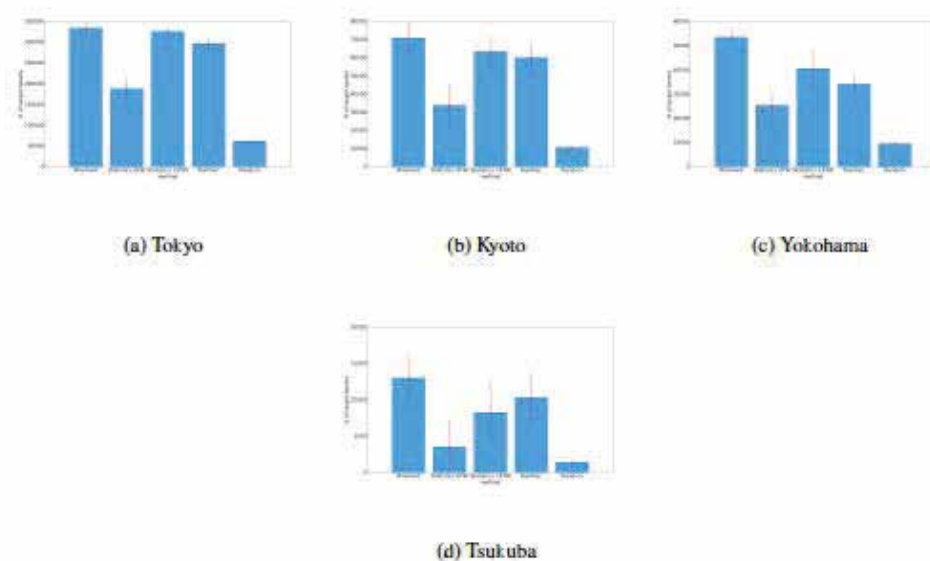


図 4 収集されたツイート数の比較

### 【3】 XML・Web プログラミング

（関連研究費：文科省／理研受託研究，NICT 受託研究，科研費・基盤研究(B)，科研費・基盤研究(A)，富士通受託研究）

#### (1) LOD に対する OLAP 分析のための ETL フレームワーク

Linked Open Data (LOD)はデータを公開する枠組みとし欧州を中心に全世界的に広がっている．これまですでに様々なデータが LOD として公開されており，今後もますます増



えていくことが予想される．最も有名なデータは DBpedia である．DBpedia のような辞典データだけでなく、様々な事実が LOD データとして公開されてきている．例えば、東日本大震災に関するデータを東日本大震災アーカイブ福島協議会が収集し、公開している．このように多様なデータが LOD として公開されるようになってきており、LOD として公開されたデータを分析したいという要求がある．

データの分析方法として、伝統的な方法として OLAP (Online Analytical Processing) がある．OLAP は複数の属性を持ったデータに対する分析手法で対話的に分析を行うことができる．分析者はいろいろな側面から分析を行いたいと考えることが多く、OLAP はそのような分析時に有用である．

本研究の目的は LOD で公開されたデータを OLAP 分析できるようにすることである．LOD として公開されたデータはそのままでは OLAP 分析できない形式になっている．そのために、まず LOD として公開されたデータを解析し、OLAP 分析可能な形式に変換する必要がある．加えて、LOD として公開されているデータはデータサイズが大きく、データを取得する際にクエリを発行してデータを取得する必要がある．このようにデータを取得するだけでも大きな労力になってしまう．

これらの問題点に対し、昨年度は OLAP 分析に必要なデータを LOD データから段階的に取得するフレームワーク SPOOL を提案した．これに対して、本年度は LOD で公開されているデータの曖昧さやより高度な分析を可能にするための手法を提案した．一つ目として、エンティティの属するクラスやプロパティの曖昧さを回避するためのクラスタリング手法を提案した．クラスとプロパティは相互に関係しており、提案するクラスタリング手法ではこの相互関係を考慮した類似尺度を提案した．これにより、クラスを表現するのにふさわしいプロパティクラスおよびプロパティを表現するのにふさわしいクラスクラスを検出する．人手によるクラスタリングの精度判定により、提案手法の有用性を示した．また、高度な分析を行うために SPOOL をより階層的な分析を行うための情報を抽出するよう拡張した H-SPOOL を提案した．H-SPOOL では SPOOL で抽出していた分析のための属性に加えて、その上位概念を階層的に抽出するように拡張した．

## (2) 関係ストリームデータに対するキーワード検索

情報源からリアルタイムに送信されるデータを（データ）ストリームといい、計測機器やネットワーク技術の進展とともに、ストリーム型の情報源が増加している．本研究では、リレーション（関係データ）に対して新規のレコードがストリーム形式で配信される関係ストリームを対象とする．関係ストリームには、従来、CQL や Jaql などの問合せ言語を使うことで問合せを記述することが一般的であるが、言語習得やリレーションの構造を理解する必要があり、利用に対する障壁が高い．このため、問合せとしていくつかのキーワードのみを使って関係ストリームに対して問合せを行う手法が研究されてきた．

関係ストリームに対するキーワード検索では、検索キーワード集合が与えられると、それらを全て含むタプルネットワーク (network of tuples) を結果として返却する．S-KWS や SS-KWS などの従来手法では、効率的な問合せ処理のため、あらかじめ可能なキーワードとリレーションの結合パターンを全て列挙し、新たなタプルが到着するたびに照合する CN を探索することで問合せ処理を行う．このとき、CN の多くは共通部分を持つため、この処理を共通化することで性能改善を図っている．

ところが、CN ベースのアプローチでは、検索キーワードの数や、タプルネットワークのサイズが大きくなるにつれ、生成される CN の数が指数関数的に増大し、処理性能が劣化するという問題があった．そこで本研究では、既存手法に比べてさらに CN の共有を可能にする MX 構造を提案した (図 5)．従来の CN に比べて、可能な限り共通するエッジを共通化

し、その上で問合せ処理を実現するために、各ノードにバッファを関連付けている。関係タプルが到着すると、それらは対応するノードに到達し、バッファ内の適切な位置で管理されることで効率的な処理が実現される。実験による評価により、既存手法に比べて処理性能を大幅に改善できることを示した（図 6）。

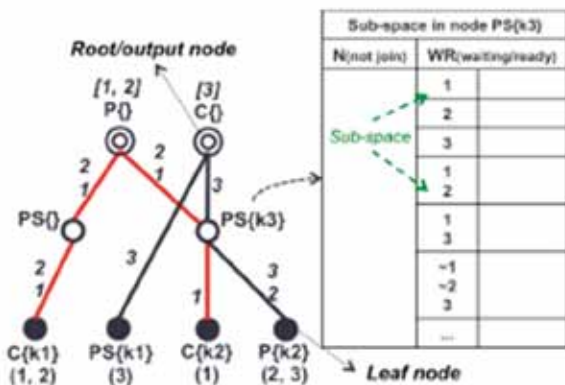


図 5 MX 構造 (MX-Structure)

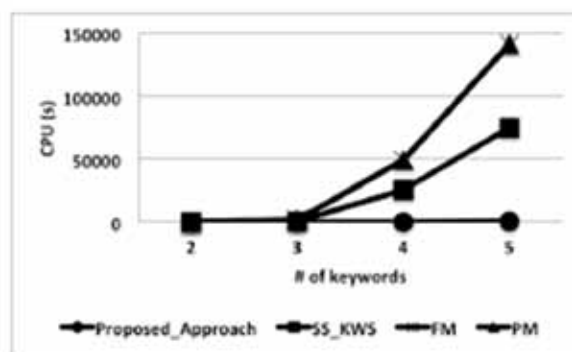


図 6 評価実験

#### 【4】 科学分野におけるデータベース応用

（関連研究費：文科省／TGI 受託研究，科研費・新学術領域）

##### (1) GPV/JMA アーカイブ

地球環境研究部門と共同で、気象庁気象予報データベース「GPV/JMA アーカイブ」(<http://gpvjma.ccs.hpcc.jp>)の開発、および管理、運用を行っている（図 7）。GPV/JMA アーカイブは、気象庁が公開している気象予報グリッドデータ（GPV データ）を蓄積するとともに、外部登録ユーザへのデータを提供することを目的としている。GPV/JMA アーカイブで提供しているデータは、全球モデル、メソスケールモデル、リージョナルスケールモデル、週間アンサンブル、月間アンサンブル、季間アンサンブルの 6 種類である。



図 7 GPV/JMA アーカイブ

##### (2) 格子 QCD データグリッド ILDG/JLDG

Japan Lattice Data Grid (JLDG), International Lattice Data Grid (ILDG)は、格子 QCD 配位データを共有するためのデータグリッドである。素粒子物理研究部門と連携し、JLDG/ILDG の運営に継続参画している。

##### (3) 時系列を考慮した睡眠ステージ判定

睡眠計測のための脳波解析の自動化に向け、マウスから取得された脳波および筋電図を用いた睡眠ステージの自動判定手法アルゴリズム・ソフトウェアの開発を昨年度から引き続き実施した。本年度は医学の臨床研究において求められる分析精度 95%を達成することを目標に、(a) 睡眠ステージ判定に有効な特徴量の検証、(b) 睡眠ステージ判定に効果的な特徴量を利用した高精度な睡眠ステージ判定手法 MASC の開発、ならびに(c)ロバストな睡眠ステ



ージ判定に向けた Deep Neural Network を用いた睡眠ステージ判定手法の開発と検証を実施した。以下では、(b)の高精度な睡眠ステージ判定手法 MASC について述べる。

本年度は我々が行った分析により、睡眠ステージ判定には睡眠ステージが時系列的にどのようなに変化したかを示す時系列特徴量を利用することが効果的であることが分かった。そこで、与えられた test data から時系列特徴量を自動抽出し、睡眠ステージ遷移を考慮した睡眠ステージ判定を行うアルゴリズム MASC を提案した。

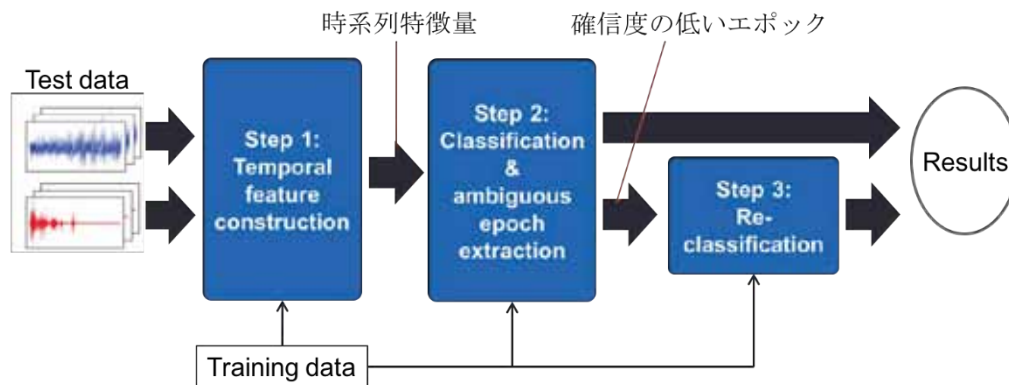


図 8 提案手法 MASC の概要

MASC の概要を図 8 に示す。MASC は、(Step 1) 時系列特徴量抽出、(Step 2) 時系列特徴量を用いた分類、および (Step 3) 確信度の低いエポックに対する再分類の 3 部から構成される。(Step 1) 時系列特徴量抽出では、人手でラベル付けした信頼性の高い Training data を用いて学習した SVM (Support Vector Machine) により test data を分類し、その分類結果から時系列特徴量を作成する。その後、(Step 2)において、作成した時系列特徴量を基に睡眠ステージの判定を行う。この際に判定結果の確信度が低くなったエポックについては、後続の(Step 3)に入力する。(Step 3)では、確信度が低い判定結果を持ったエポックの判定結果を修正するために、再分類を行う。再分類では、本来ノンレム睡眠であるエポックが(Step 2)においてレム睡眠と判定される確率が高いことに着目し、ノンレム睡眠のみを高精度に抽出可能な分類機を利用する。

本年度は提案したアルゴリズム MASC のソフトウェアを開発するとともに、比較的脳波・筋電データにノイズの少ないマウス 14 匹分、および睡眠障害や薬物投与などの影響により脳波・筋電データにノイズを多く含んだマウス 10 匹分を用いて性能評価を行った。性能評価の結果、提案技術 MASC はノイズの少ないマウスに対して約 95%、ノイズを含んだマウスに対しても 92%と従来技術をそれぞれ 4%~20%および 10%~20%程度上回る精度を示すことを明らかにした。本研究成果は平成 29 年度以降に、実用の睡眠ステージ判定ソフトウェアに組み込まれる予定である。

#### 4. 教育

学生の指導状況 (学生氏名、学位の種類、論文名)

<博士 (工学) >

##### 1. Savong Bou

A Study on Keyword Search over Structured and Semi-Structured Data Streams

2. 小澤 祐介

A Study on GPU-Accelerated Data Analysis Techniques

<修士（工学）>

1. 上田 紗希

バンディットアゴリズムを用いた特定地域から発信されたツイートの収集

2. 篠塚 千愛

データとクエリを秘匿した暗号化データベースの問合せ処理高速化

3. 伊藤 寛祥

非負値行列分解を用いた論文データベースの分析

4. 奥村 彩水

リンク構造解析を用いた **Linked Open Data** に対するキーワード検索

5. 久米 慶太郎（生命環境科学研究科生物科学専攻とのデュアルディグリー）

機械学習を用いたミトコンドリアおよび関連オルガネラタンパク質の予測手法

6. 太田 千尋

床に投影したマイクロタスク結果データの品質向上

7. 坂詰 知完

動的なデータ集合に対応した対話的外れ値分析手法

8. 鈴木 悠太

マウスの脳波/筋電データを利用した睡眠ステージ判定

9. 長 裕敏

ストリーム/バッチ統合型ビッグデータ処理基盤と処理最適化

<修士（工学）：特定課題研究>

1. 小寺 暁久

動画およびスライドに特化したコンテンツ共有サービスの開発

-ユーザエクスペリエンスを考慮したフロントエンドの設計および実装-

<学士（情報科学，情報工学）>

1. 佐藤 朋紀

大規模グラフに対する **ObjectRank** の高速化に関する研究

2. 菅野 健太

メニーコアプロセッサを用いた集合間類似結合の高速化

3. 永野 真知

GitHub と Stack Overflow の活動記録を併用したリポジトリ推薦

4. 山部 剛士

ディープラーニングを用いた睡眠ステージ判定

5. 那須 勇弥

移動体に関するストリームデータに対する空間的 OLAP システムの提案

6. 三浦 大地

Spark を利用した密度ベースクラスタリング OPTICS の高速化

集中講義など

1. 大学院共通科目「計算科学リテラシー」（日本語・英語），分担：天笠

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 【受賞】

（賞の名称、受賞者名、タイトル、年月日）

1. Best Paper Award: Yuyang Dong, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, Hiroyuki Kitagawa, "Aggregate Reverse Rank Queries", 27th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2016), September 5-8, 2016.
2. 学生プレゼンテーション賞：董 于洋, "A High-dimensional Solution for Aggregate Reverse Rank Queries", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), G1-1, 2017 年 3 月 6 日.
3. 学生プレゼンテーション賞：伊藤 寛祥, "ノードが複数の属性を持つグラフにおけるコミュニティ検出", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), 2017 年 3 月 6 日.
4. 学生プレゼンテーション賞：鈴木 悠太, "マウスの脳波／筋電データを利用した睡眠ステージ判定", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), 2017 年 3 月 7 日.
5. 学生プレゼンテーション賞：長城 沙樹, "時間的相関性を考慮した Twitter に対するエンティティリンキング", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), 2017 年 3 月 8 日.
6. 学生プレゼンテーション賞：草村 優太, "SIFT 特徴量を用いた画像検索の GPU による高速化", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), 2017 年 3 月 7 日.

7. 学生奨励賞：佐藤 朋紀, "大規模グラフに対する逐次的なノードの枝刈りを用いた ObjectRank の高速化", 情報処理学会第 79 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2017), 2017 年 3 月 16 日.
8. 学生奨励賞：菅野 健太, "メニーコアプロセッサを用いた集合間類似結合の高速化", 情報処理学会第 79 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2017), 2017 年 3 月 16 日.
10. 学生奨励賞：永野 真知, "GitHub と Stack Overflow におけるユーザ行動の統一的な分析", 情報処理学会第 79 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2017), 2017 年 3 月 16 日.
11. 学生奨励賞：三浦 大地, "Spark を利用した密度ベースクラスタリング OPTICS の高速化", 情報処理学会第 79 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2017), 2017 年 3 月 16 日.
12. 学生奨励賞：山部 剛士, "深層学習を用いたマウスの睡眠ステージ分析", 情報処理学会第 79 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2017), 2017 年 3 月 16 日.
13. 第 16 回日本データベース学会論文賞：塩川 浩昭, 藤原 靖宏, 飯田 恭弘, 鬼塚 真, "動的グラフに対する密度ベースクラスタリング", 日本データベース学会和文論文誌, Vol. 14, No.4, Article No.4, 2016 年 3 月発行 2016 年 6 月 18 日受賞
14. 電子情報通信学会優秀論文賞：藤原 靖宏, 中辻 真, 塩川 浩昭, 三島 健, 鬼塚 真, "Personalized PageRank に対するアドホックな検索手法", 電子情報通信学会論文誌 D Vol.J98-D, No.5, pp.774-787, May 2015 発行 2016 年 6 月 2 日受賞
15. 情報処理学会第 78 回大会優秀賞：秋山 賢人, "索引を用いた秘匿検索における安全性の高い複数演算の連携法"2017 年 3 月 16 日受賞

## 【外部資金】

(名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

受託経費：文部科学省/理化学研究所 (平成 26 年度～平成 29 年度)

研究課題：実社会ビッグデータ利活用のためのデータ統合・解析技術の研究開発

研究代表者：北川 博之

平成 28 年度配分額：32,967 千円 (直接経費 29,970 千円：間接経費 2,997 千円)

受託経費：情報通信研究機構 (平成 28 年度～平成 31 年度)

研究課題：欧州との連携による公共ビッグデータの利活用基盤に関する研究開発

研究代表者：北川 博之

平成 28 年度配分額：8,250 千円（直接経費 7,500 千円：間接経費 750 千円）

受託経費：文部科学省/つくばグローバル・イノベーション推進機構（平成 28 年度～平成 32 年度）

事業名称：＜イノベーションシステム整備事業＞地域イノベーション・エコシステム形成プログラム「つくばイノベーション・エコシステムの構築（医療・先進技術シーズを用いた超スマート社会の創成事業）」

研究分担者：北川 博之

平成 28 年度配分額：15,000 千円

研究種目：基盤研究(B)（平成 26 年度～平成 28 年度）

研究課題：複合型並列計算環境を活用した大規模不均質データの実時間分析基盤

研究代表者：北川 博之

平成 28 年度配分額：4,940 千円（直接経費 3,800 千円：間接経費 1,140 千円）

研究種目：研究活動スタート支援（平成 28 年度～平成 29 年度）

研究課題：大規模グラフの頻出部分構造を利用した高速な分析アルゴリズムの開発

研究代表者：塩川 浩昭

平成 28 年度配分額：1,560 千円（直接経費 1,200 千円：間接経費 360 千円）

研究種目：新学術領域（平成 27 年度～平成 31 年度）

研究課題：超ストレス環境・宇宙を見据えた新規睡眠覚醒制御手法の開発  
（研究代表者：長瀬 博）

研究分担者：北川 博之

平成 28 年度配分額：3,000 千円

研究種目：基盤研究(A)（平成 25 年度～平成 28 年度）

研究課題：災害後の復旧・復興における共有情報管理のための基盤技術に関する研究  
（研究代表者：横田 治夫（東京工業大学））

研究分担者：天笠 俊之

平成 28 年度配分額：650 千円（直接経費 500 千円：間接経費 150 千円）

受託経費：Sky 株式会社（平成 27 年度～平成 28 年度）

研究課題：機械学習の適用による SKYSEA Client View のログ及び資産情報からの例外的  
状況の自動検出

研究代表者：北川 博之・天笠 俊之

平成 27 年度~28 年度配分額：5,000 千円（直接経費 4,500 千円：間接経費 500 千円）

受託経費：株式会社富士通研究所（平成 28 年度）

研究課題：多様なデータの統合・活用のための基盤技術

研究代表者：北川 博之・天笠 俊之・塩川 浩昭

平成 28 年度配分額：2,000 千円（直接経費 1,538.462 千円：間接経費 461.538 千円）

**【知的財産権】**（種別、氏名、課題名、年月日）

特許・実用新案（登録）

塩川 浩昭

グラフの構造的クラスタリング高速化装置，方法，プログラム

2016 年 11 月 11 日

特許・実用新案（公開）

新井 淳也，塩川 浩昭

リオーダーリング装置、リオーダーリング方法およびリオーダーリングプログラム

2016 年 8 月 22 日

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

<学術雑誌論文>

- J1. Ryosuke Koyanagi, Ryo Furukawa, Tsubasa Takahashi, Takuya Mori, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "A Scheme for Fast k-Concealment Anonymization", IEICE Transactions on Information and Systems, Vol.E99-D, No. 4, pp. 1000-1009, Apr. 2016.
- J2 . Atsuyuki Morishima, Shun Fukusumi, and Hiroyuki Kitagawa, "CyLog/Game Aspect: An Approach to Separation of Concerns in Crowdsourced Data Management", Information Systems, Volume 62, pp. 170-184, December 2016.

- J3. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "H-SPOOL: A SPARQL-based ETL Framework for OLAP over Linked Data with Dimension Hierarchy Extraction", International Journal of Web Information Systems (IJWIS), Vol. 12 , Iss. 3 , pp. 359-378, 2016.
- J4 . Mateus S. H. Cruz, Yusuke Kozawa, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa,"Accelerating Set Similarity Joins Using GPUs", Transactions on Large-Scale Data and Knowledge-Centered Systems XXVIII: Special Issue on Database and Expert Systems Applications (TLDKS), pp. 1-22, 2016.
- J5. 藤森 俊匡, 塩川 浩昭, 鬼塚 真, "分散グラフ処理におけるグラフ分割の最適化", 情報処理学会論文誌：データベース(TOD72), Vol. 9, No. 4, 2016.

**B) 査読無し論文**

該当なし

**(2) 国際会議発表**

**A) 招待講演**

- I1 . Hiroyuki Kitagawa, "Real World Big Data Integration and Analysis: Research Issues and Challenges", ACM International Conference on Ubiquitous Information Management and Communication (ACM IMCOM 2017) , Beppu, Japan, January 5, 2017.

**B) 一般講演**

<査読付き国際会議論文>

- C1. Salman Ahmed Shaikh, Yousuke Watanabe, Yan Wang, Hiroyuki Kitagawa, "Smart Query Execution for Event-driven Stream Processing", Proc. 2nd IEEE International Conference on Multimedia Big Data (IEEE BigMM 2016), pp. 97-104, Taipei, Taiwan, April 20-22, 2016.
- C2. Kento Kawai, Hiroyuki Kitagawa, "Collaborative Filtering with Implicit Feedbacks by Discounting Positive Feedbacks", Proc. 2nd IEEE International Conference on Multimedia Big Data (IEEE BigMM 2016), pp. 41-48, Taipei, Taiwan, April 20-22, 2016.
- C3. Junya Arai, Hiroaki Shiokawa, Takeshi Yamamuro, Makoto Onizuka, Sotetsu Iwamura, "Rabbit Order: Just-in-time Parallel Reordering for Fast Graph Analysis", Proc. 30th IEEE International Parallel & Distributed

- Processing Symposium (IPDPS 2016), pp. 22-31, Chicago, Illinois, USA, May 23-27, 2016.
- C4. Yuto Yamaguchi, Christos Faloutsos, Hiroyuki Kitagawa, "CAMLPL: Confidence - Aware Modulated Label Propagation", SIAM International Conference on Data Mining (SDM 2016), pp. 513-521, Miami, Florida, USA, May 5-7, 2016.
- C5. Hiroyoshi Ito, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Detecting Topic Evolutions in Bibliographic Databases Exploiting Citations", Proc. 26th International Conference on Information Modelling and Knowledge Bases (EJC 2016), pp. 489-504, Tampere, Finland, June 6-10, 2016.
- C6. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "Visual Spatial-OLAP for Vehicle Recorder Data on Micro-sized Electric Vehicles", Proc. 20th International Database Engineering & Applications Symposium (IDEAS 2016), pp. 358-363, Montreal, QC, Canada, July 11-13, 2016 (short paper).
- C7. Savong Bou, Toshiyuki Amagasa, Hiroyuki Kitagawa, "An Improved Method of Keyword Search over Relational Data Streams by Aggressive Candidate Network Consolidation", Proc. 27th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2016), pp. 336-351, Porto, Portugal, September 5-8, 2016.
- C8. Salman Ahmed Shaikh, Dong Chao, Kazuya Nishimura, Hiroyuki Kitagawa, "Incremental Continuous Query Processing over Streams and Relations with Isolation Guarantees", Proc. 27th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2016), pp. 321-335, Porto, Portugal, September 5-8, 2016.
- C9. Yuyang Dong, Hanxiong Chen, Kazutaka Furuse, Hiroyuki Kitagawa, "Aggregate Reverse Rank Queries", Proc. 27th International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA 2016), pp. 87-101, Porto, Portugal, September 5-8, 2016.
- C10. Yuki Nishimura, Toshiyuki Amagasa, Yuji Inagaki, Tetsuo Hashimoto, and Hiroyuki Kitagawa, "A system for supporting phylogenetic analyses over alignments of next generation sequence data", Proc. 10th International Conference on Complex, Intelligent, and Software Intensive Systems (CISIS-2016), pp. 230-237, Fukuoka, Japan, July 6-8, 2016.



- C11. Yuta Kusamura, Yusuke Kozawa, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "GPU Acceleration of Content-based Image Retrieval based on SIFT Descriptors", Proc. the 5th International Workshop on Advances in Data Engineering and Mobile Computing in conjunction with NBiS2016 (DEMoC 2016), pp.3 42-347, Ostrava, Czech Republic, September 7-9, 2016.
- C12. Hirotochi Cho, Hiroaki Shiokawa and Hiroyuki Kitagawa, "JsFlow: Integration of Massive Streams and Batches via JSON-based Dataflow Algebra", Proc. 19th International Conference on Network-Based Information Systems (NBIS 2016), pp. 188-195, Ostrava, Czech Republic, September 7-9, 2016.
- C13. Saki Nagaki, Yuto Yamaguchi, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Local Attention Analysis and Prediction of Online News Articles in Twitter", International Workshop On Mobile Ubiquitous Systems, Infrastructures, Communications, And Applications (MUSICAL 2016), pp. 131-136, Hiroshima, Japan, November 28, 2016.
- C14. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa, and Hiroyuki Kitagawa, "Interleaving Clustering of Classes and Properties for Disambiguating Linked Data", Proc. the 18th International Conference on Asia-Pacific Digital Libraries (ICADL 2016), pp. 251-256, Tsukuba, Japan, December 5-9, 2016.
- C15. Takahiro Komamizu, Toshiyuki Amagasa, Salman Ahmed Shaikh, Hiroaki Shiokawa and Hiroyuki Kitagawa, "Towards Real-time Analysis of Smart City Data: A Case Study on City Facility Utilizations", Proc. the 14th IEEE International Conference on Smart City (SmartCity 2016), pp. 1357-1364, Sydney, Australia, December 12-14, 2016.
- C16. Yuyang Dong, Hanxiong Chen, Jeffrey Xu Yu, Kazutaka Furuse, Hiroyuki Kitagawa, "Grid-Index Algorithm for Reverse Rank Queries", Proc. 20th International Conference on Extending Database Technology (EDBT 2017), pp. 306-317, Venice, Italy, March 21-24, 2017.
- C17. Salman Ahmed Shaikh and Hiroyuki Kitagawa, "Approximate OLAP on Sustained Data Streams", Proc. 22nd International Conference on Database Systems for Advanced Applications (DASFAA 2017), pp. 102-118, Suzhou, China, March 27-30, 2017.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

- T1. 北川博之, "機械学習を用いた睡眠ステージの自動判定", 筑波大学医学医療系・計算科学研究センター共催講演会「計算科学が拓くライフサイエンスの未来」, 2016 年 9 月 30 日.
- T2. 天笠俊之, "データ基盤分野における生物学とのコラボレーションー機械学習によるミトコンドリアタンパク質予測とアライメント管理データベースー", 筑波大学医学医療系・計算科学研究センター共催講演会「計算科学が拓くライフサイエンスの未来」, 2016 年 9 月 30 日.
- T3. 北川博之, "実社会ビッグデータ利活用のためのデータ統合・解析技術の研究開発", JST・NSF 国際連携シンポジウムービッグデータ, 人工知能, IoT, サイバーセキュリティが創る新たな社会ー, 2016 年 11 月 30 日.
- T4. 塩川 浩昭, "SIGMOD2016 参加報告", 第 26 回先端的データベースと Web 技術動向講演会(ACM SIGMOD 日本支部第 63 回支部大会), 2016 年 10 月 29 日.
- T5. 塩川 浩昭, "大規模グラフデータ分析入門", 第 8 回「学際計算学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム・発展する計算科学と次世代の計算機-, 2016 年 10 月 18 日.
- T6. 塩川 浩昭, "大規模グラフのためのクラスタリングアルゴリズム", 数理人セミナー, 2017 年 3 月 10 日.

B) その他の発表

- P1. 久米慶太郎, 天笠俊之, 橋本 哲男, 北川 博之, "機械学習を用いた非モデル生物におけるミトコンドリア及び関連オルガネラタンパク質の予測手法", 情報処理学会研究報告バイオ情報学 (BIO) (2016-BIO-46(25)), pp.1-6, 2016 年 6 月 27 日.
- P2. 坂詰知完, 北川博之, 天笠俊之, "データの動的な変化に対応可能な対話的外れ値分析", 第 9 回 Web とデータベースに関するフォーラム Vol.2016-DBS-163 No13 (WebDB Forum 2016), 2016 年 9 月 13~9 月 15 日.
- P3. 合田 真也, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "CryptDB の処理時間分析と高速化案", 情報処理学会研究報告データベースシステム (DBS) (2017-DBS-164(8)), 1-6, 2017 年 1 月 10 日.
- P4. 董 于洋, 王 嵩, 陳 漢雄, 古瀬 一隆, 北川 博之, "A High-dimensional Solution for Aggregate Reverse Rank Queries", 第 9 回データ工学と情報マ

ネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), G1-1, 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.

- P5. 伊藤 寛祥, 駒水 孝裕, 天笠 俊之, 北川 博之, "ノードが複数の属性を持つグラフにおけるコミュニティ検出", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム(DEIM 2017), E2-1, 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P6. 上田 紗希, 山口 祐人, 北川 博之, "バンディットアルゴリズムを用いた特定地域から発信されたツイートの収集", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), D8-5, 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P7. 坂詰 知完, 北川 博之, 天笠 俊之, "動的なデータ集合に対応した対話的外れ値分析手法", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), I2-4, 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P8. 長 裕敏, 塩川 浩昭, 北川 博之, "ストリーム処理とバッチ処理の統合と実行最適化", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), A1-4, 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P9. 鈴木 悠太, 佐藤 牧人, 塩川 浩昭, 柳沢 正史, 北川 博之, "マウスの脳波/筋電データを利用した睡眠ステージ判定", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), E6-1, 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P10. 篠塚 千愛, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "暗号化データベースにおけるデータの秘匿性を保証した検索手法", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), H6-4, 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P11. 長城 沙樹, 北川 博之, "時間的相関性を考慮した **Twitter** に対するエンティティリンキング", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), D8-4, 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P12. 高橋 知克, 塩川 浩昭, 北川 博之, "メニーコアプロセッサを用いた構造的類似度に基づくグラフクラスタリングの高速化", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), E2-2, 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P13. 草村 優太, 天笠 俊之, 北川 博之, "SIFT 特徴量を用いた画像検索の GPU による高速化", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), E7-3, 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P14. 秋山 賢人, 渡辺 知恵美, 北川 博之, "秘匿検索フレームワーク **OSIT** における最適なクエリプラン選択法", 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), H6-5, 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.

- P15. 佐藤 朋紀, 塩川 浩昭, 山口 祐人, 北川 博之, "大規模グラフに対する ObjectRank の高速化", 第9回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), C8-1, 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P16. 那須 勇弥, 塩川 浩昭, 天笠 俊之, 北川 博之, "空間情報をもつストリームデータに対する効率的な OLAP システム提案", 第9回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), E4-3, 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P17. 藤森 俊匡, 塩川 浩昭, 鬼塚 真, "効率的な分散グラフ処理のためのグラフ分割", 第9回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM 2017), 2017 年 3 月 6 日～3 月 8 日.
- P18. 佐藤 朋紀, 塩川 浩昭, 北川 博之, "大規模グラフに対する逐次的なノードの枝刈りを用いた ObjectRank の高速化", 情報処理学会第 79 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2017), 2017 年 3 月 16 日～3 月 18 日.
- P19. 菅野 健太, 天笠 俊之, 北川 博之, "メニーコアプロセッサを用いた集合間類似結合の高速化", 情報処理学会第 79 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2017), 2017 年 3 月 16 日～3 月 18 日.
- P20. 永野 真知, 早瀬 康裕, 駒水 孝裕, 北川 博之, "GitHub と Stack Overflow におけるユーザ行動の統一的な分析", 情報処理学会第 79 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2017), 2017 年 3 月 16 日～3 月 18 日.
- P21. 那須 勇弥, 塩川 浩昭, 天笠 俊之, 北川 博之, "ストリームデータに対する空間的 OLAP システムの設計と開発", 情報処理学会第 79 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2017), 2017 年 3 月 16 日～3 月 18 日.
- P22. 三浦 大地, 天笠 俊之, 北川 博之, "Spark を利用した密度ベースクラスタリング OPTICS の高速化", 情報処理学会第 79 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2017), 2017 年 3 月 16 日～3 月 18 日.
- P23. 山部 剛士, 北川 博之, 塩川 浩昭, 柳沢 正史, 佐藤 牧人, "深層学習を用いたマウスの睡眠ステージ分析", 情報処理学会第 79 回全国大会 (IPSJ 全国大会 2017), 2017 年 3 月 16 日～3 月 18 日.

#### (4) 著書、解説記事等

該当なし

#### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

- 地球環境研究部門との連携: 気象庁気象予報データベース「GPV/JMA アーカイブ」(<http://gpvjma.ccs.hpcc.jp>)の開発, 管理, 運用.

- 素粒子物理研究部門との連携：Japan Lattice Data Grid (JLDG), International Lattice Data Grid (ILDG)の運営.
- 生命科学研究部門との連携：機械学習を用いた非モデル生物におけるミトコンドリア及び関連オルガネラタンパク質の予測に関する研究.
- 国際統合睡眠医科学研究機構(IIIS)との連携:マウスの脳波／筋電図データを利用した睡眠ステージの自動判定アルゴリズム・ソフトウェアの研究開発.
- Carnegie Mellon University とのソーシャルメディア分析に関する国際共同研究.
- 生命環境科学研究科環境バイオマス専攻との連携：「機械学習を用いた微生物増殖の予測」

## 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

- 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム（DEIM フォーラム 2017），高山グリーンホテル（岐阜県高山市），2017 年 3 月 6 日（月）～3 月 8 日（水）

## 9. 管理・運営

北川博之教授

- 学外
  - 日本データベース学会監事
- 学内
  - システム情報工学研究科：研究科長
  - 計算科学研究センター：計算情報学研究部門長，計算科学振興室長

天笠俊之准教授

- 学外
  - 該当なし.
- 学内
  - コンピュータサイエンス専攻英語プログラム推進室長
  - 情報科学類計算機運用委員長

塩川浩昭助教

- 学外
  - 該当なし.
- 学内
  - 該当なし.

## 10. 社会貢献・国際貢献

北川博之教授

- 国際委員等
  - 国際ジャーナル編集委員：World Wide Web Journal
  - 国際会議運営委員：WAIM Steering Committee Member, DASFAA Steering Committee Member Emeritus
  - 国際会議プログラム委員：AAAI2017, IDEAS2016, ACM SAC2016
- 国内委員等
  - 日本学術会議連携会員
  - (独) 科学技術振興機構・戦略的創造研究推進事業「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」領域アドバイザー

天笠俊之准教授

- 国際委員等
  - ACM SIGMOD 日本支部 副支部長
  - 国際会議プログラム委員：DSAA2016, DaWaK2016, FutureTech2016, ICADL2016, FAB2016, DASFAA2016, DEMoC-2016, IDEAS2016, OBD2016, WISE2016, iiWAS2016 他.
- 国内委員等
  - 情報処理学会ドキュメントコミュニケーション研究会幹事

塩川浩昭助教

- 国際委員等
  - プログラム委員：ICSC2017
  - 国際ジャーナル査読委員：IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, IEICE Transactions on Information & Systems, Proceedings of VLDB Endowment (PVLDB), DBSJ Journal 他.
  - 国際会議査読委員：DASFAA2017, ICSC2017
- 国内委員等
  - 日本データベース学会電子広報委員会編集委員
  - 第 9 回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM フォーラム 2017) Web 出版委員長

## 11. その他

該当なし

## VII-2. 計算メディア分野

### 1. メンバー

教授 亀田 能成

准教授 北原 格

学生 大学院生 16 名、学類生 4 名、研究生 1 名

### 2. 概要

当グループが属する計算情報学研究部門は、「中長期的観点から計算科学の研究を抜本的に発展させる斬新な方法の開拓研究を行う部門」として、2004 年度に発足した部門であり、人間社会とその環境を主な対象とする新しい計算科学の枠組みを創成し、その基盤を確立することを目標として研究活動を推進している。

純粋なデータ処理の効率や速度が求められる通常のスーパーコンピュータ分野とは違い、人間に纏わる情報を処理対象とする計算科学では、情報処理の時間軸を人間に合わせることに必須である。そのために、グローバルに広がる人間社会とそれを取り巻く環境（生活空間や都市環境など）を対象とした研究を進めている。それによって得られる実観測データとシミュレーション結果とを融合させた情報を、人間に分かり易い形で提示し人間社会へフィードバックするために、計算メディアを仲立ちとするコンピューテーションの新しい枠組みを提案している。

具体的な取り組みとしては、“実世界の情報をセンシングする機能”，“多様な情報を処理する潤沢な計算機能”，“情報を選択・蓄積する大規模データベース機能”を、コンピュータネットワーク上で融合することにより大規模知能情報メディアをバックボーンとして実現していく。これを総称して実世界計算情報学と呼んでいる。そのバックボーン上で、先端的要素技術の研究開発と、ニーズに密着した応用システムの研究開発を並行して進めている。本年度の報告では、下記の 2 件の研究について概要を説明する。

#### 【1】環境埋め込み型カメラの撮影空間における人物像の映像的復元（亀田）

本研究では、透明スクリーンに実物大の被写体映像を投影し、利用者に対し被写体の AR 提示をすることで、利用者が室内環境を見渡しながら、同時に被写体を視認できる手法を提案する。

#### 【2】撮影距離の異なる 2 台のカメラ間の視点移動表現法（北原）

撮影空間を取り囲むように配置した多視点カメラと撮影空間内部に設置した全方位カメラを併用することにより、外側からでは観察できない内側からの見え方の観察を可能とする映像の撮影提示方式に関する研究に取り組んでいる。内外カメラで撮影された見え方の大きく異なる 2 種類の映像を単純に切り替えた場合、撮影距離の違いによって被写体の見え方が急激に変化するため、視点移動を知覚しにくくなることが懸念される。



撮影距離の異なる 2 台のカメラ間の視点遷移映像を生成することにより、視点移動感を表現する手法を提案する。

### 3. 研究成果

#### 【1】環境埋め込み型カメラの撮影空間における人物像の映像的復元（亀田）

##### 研究の概要

近年、環境埋め込み型カメラが様々な場所に設置されている。多くの環境埋め込み型カメラは常に映像を取得し続けている。映像を閲覧する利用者の目的のひとつが、映像中に存在する人物などの被写体の様子の理解である。映像中の被写体の様子を理解するためには、被写体の大きさや動作、位置や向きといった情報を、環境埋め込み型カメラが設置された環境と合わせて理解することが重要である。そのため、被写体の様子を環境に合わせて理解しやすい形で利用者に提示することが望まれている。

本研究では、固定された環境埋め込み型カメラで撮影されたある室内環境で、利用者が映像を閲覧する状況を想定する。そのような状況で、利用者が被写体の様子を室内環境に合わせて理解するためには、被写体が室内環境で行った動作や移動をもう一度実際に再現し、利用者が室内環境を見渡ししながら、同時に被写体を視認するのが理想的である。そこで、記録されていた被写体映像を室内環境に合わせて実物大提示し、被写体の動作や移動を、利用者が室内環境を見渡ししながら視認できる形で仮想的に再現すれば、被写体の様子の室内環境に合わせた理解を支援できると考えられる。

利用者が室内環境を見渡ししながら、同時に映像を視認するためのデバイスとして、透明スクリーンがある。透明スクリーンは半透過型の素材を利用するスクリーンである。特徴として、プロジェクタからの映像を投影することができ、かつ半透過性であるため、利用者が透明スクリーンの向こう側も視認できる。そのため、通常のスクリーンと比較して、利用者が室内環境を見渡す妨げになりにくい。そこで本研究では、透明スクリーンに実物大の被写体映像を投影し、利用者に対し被写体の AR 提示をすることで、利用者が室内環境を見渡ししながら、同時に被写体を視認できる手法を提案する。図 1 にその概要を示す。

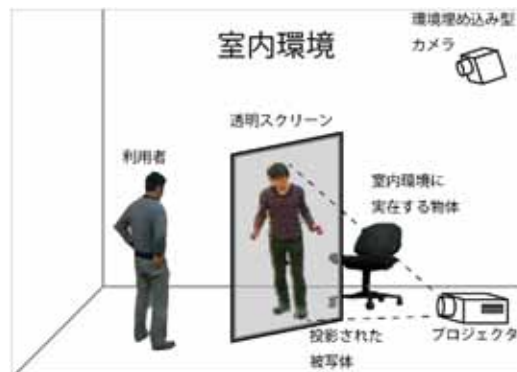


図 1：透明スクリーンを用いた被写体映像の等身大提示システム

### 映像中の被写体の実物大提示

本研究では、室内環境を移動、動作する被写体を前景として定義する．前景抽出のアルゴリズムを用いて、取得映像に対して前景抽出を行う．前景抽出によって得られた映像を前景映像と呼ぶ．前景映像にホモグラフィ変換を行い、提示映像として透明スクリーンに投影し、利用者に提示する．

現在の取り組みでは、被写体の移動に合わせての透明スクリーンの移動は、利用者が行うものとしている．透明スクリーンの位置が変わると、スクリーンに提示すべき前景の位置形状がそれに伴って変化する．このため、投影スクリーンの空間内での位置推定が必要となる．その実現のため、スクリーン上に赤外線反射マーカを設置し、スクリーン移動計測用の赤外線カメラによってそのマーカを観測する．マーカ形状を既知とすることで、スクリーンの三次元位置を推定することができる（図 2）．本手法を用いた提示の様子を図 3 に示す．

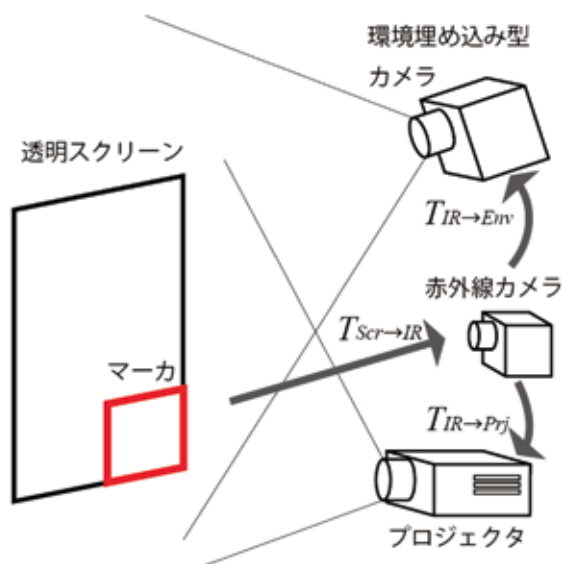


図 2：赤外線カメラによる透明スクリーン位置推定      図 3：提示結果の一例

## 【2】撮影距離の異なる 2 台のカメラ間の視点移動表現法（北原）

複数のカメラで撮影した多視点映像は、単一視点映像よりも多くの視覚情報を有するため、スポーツシーンの閲覧などの被写体の詳細な観察に用いられている [1]. 多視点映像を提示する手法の一つである Bullet-Time [2] は、被写体の周囲を取り囲むように設置した複数のカメラを用いて撮影（Outside-In 撮影）した多視点映像をカメラ配置に基づいてした順に切り替えることで、視点の移動感を伴う被写体の観察を可能とする手法である．しかし、被写体の周囲に設置したカメラで撮影（Outside-In 撮影）した映像を切り替えるだけでは、撮影空間内部に入り込んだような見え方を生成することは困難である．一方、撮影空間内部に全方位

カメラを設置することにより、撮影空間を内部から観察したパノラマ映像を撮影 (Inside-Out 撮影) することができるが、単一視点映像のため視点の移動感を提示することは困難である。

我々は、Outside-In 撮影を行う多視点カメラと Inside-Out 撮影を行う全方位カメラを組み合わせることで、Outside-In/Inside-Out 撮影双方の長所を兼ね備えた撮影方式の研究に取り組んでいる。多視点カメラに加えて、撮影空間内部に全方位カメラを設置することで、被写体を近距離から撮影した映像が利用できるため、より没入感がある上に詳細な観察も可能な映像閲覧が可能となる。しかし、図 4 に示すように、それらの映像を単に切り替えるだけでは、多視点カメラと全方位カメラの位置関係の把握が困難であり、映像切り替えの際、視点移動を知覚しながらの被写体の連続的な観察が難しくなることが懸念される。本研究では、被写体までの距離が異なる、2 種類のカメラ映像を切り替える際、それらの間を視点が疑似的に移動したような視点遷移映像を生成・内挿することによって、カメラの位置関係の把握を支援する手法を提案する。閲覧者は切り替え前後のカメラの位置関係を把握しやすくなり、切り替え前後の映像において被写体を連続的に観察することが可能となる。

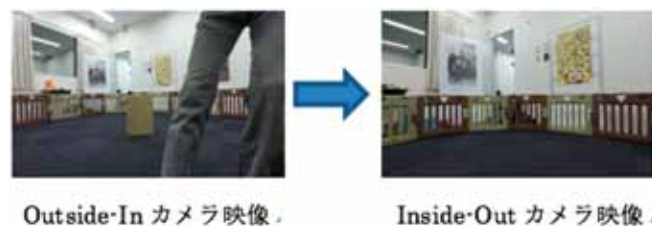


図 4：撮影距離の異なる 2 台のカメラで撮影した映像の切り替え

### Inside-Out カメラと Outside-In カメラ間の視点遷移映像

本研究では、視点移動表現を行うために、撮影空間のおおまかな 3 次元モデルを用意する。3 次元モデルを用いて視点移動表現を行うことで、運動視差の再現可能な映像の生成提示が可能となり、閲覧者がカメラの位置関係を理解しやすくなる。

図 5 に示すように Outside-In カメラと Inside-Out カメラを配置する。Outside-In カメラは、撮影区間の中央付近の一点を向くようにほぼ同じ高さのパネルの所定位置に固定されている。それらのカメラを用いて撮影した多視点映像に Structure from Motion (SfM) を適用し、カメラの内・外部パラメータを推定する。これらのカメラパラメータを用いて、壁・床・物体のおおまかな 3 次元モデルを生成する。

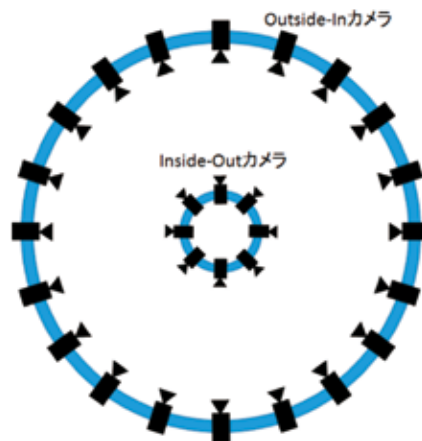


図 5 : カメラ配置の一例

床は平面形状とし、Outside-In カメラの高さから一定値だけ下方に設置する．壁の 3 次元形状は、Outside-In カメラの光軸が交わる点を中心とし床面に直立する円筒で表現する．パネルは、Outside-In カメラの位置姿勢に基づいてあらかじめ採寸したサイズの直方体を配置する．

推定した 3 次元形状に投影テクスチャマッピングを用いて多視点映像を貼り付ける．投影テクスチャマッピングとは、図 6 のようにライトを照射するように CG 物体表面にテクスチャ情報を付与する手法である[4]．

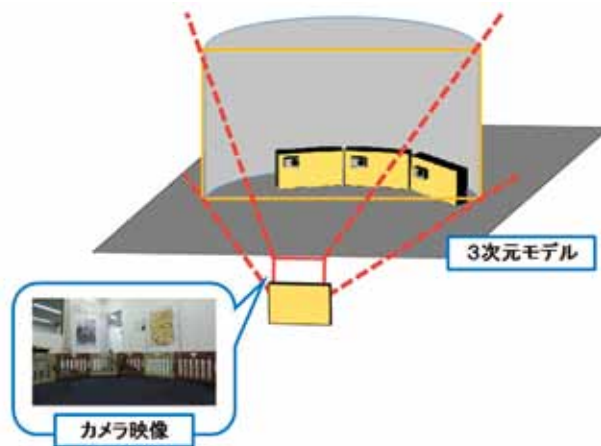


図 6 : 投影テクスチャマッピング

SfM ベースのキャリブレーションから求めた撮影空間の 3 次元モデル上におけるカメラの位置から、移動する仮想カメラの位置姿勢を求める．仮想カメラの位置ベクトル  $\boldsymbol{P}$  は、Inside-Out カメラの位置ベクトル  $\boldsymbol{P}_{in}$  と、Outside-In カメラの位置ベクトル  $\boldsymbol{P}_{out}$  を用いて式 (1) で表される．

$$\boldsymbol{P} = k\boldsymbol{P}_{in} + (1-k)\boldsymbol{P}_{out} \quad 0 \leq k \leq 1 \quad (1)$$

また、カメラの光軸の向きも同様に、仮想カメラの光軸の方向ベクトル  $\mathbf{R}$  は、Inside-Out カメラの光軸の方向ベクトル  $\mathbf{R}_{in}$  と、Outside-In カメラの光軸の方向ベクトル  $\mathbf{R}_{out}$  を用いて式(2)のように表される。

$$\mathbf{R} = k\mathbf{R}_{in} + (1-k)\mathbf{R}_{out} \quad 0 \leq k \leq 1 \quad (2)$$

式(2)を用いて仮想カメラの光軸の方向ベクトルを変化させることによって、連続的な視点移動映像を生成することができる。式(1)、(2)において変数  $k$  を変化させることによって仮想カメラは図 7 に示すように移動する。

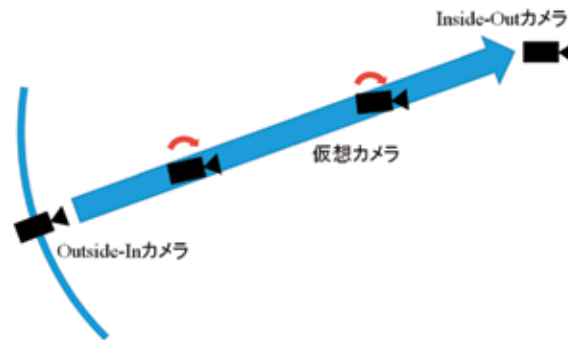


図 7：仮想カメラの位置と姿勢の変化

視点移動映像は、切り替え前後の Inside-Out カメラと Outside-In カメラから得られる 2 台のカメラ映像を仮想カメラの位置に応じた重みに応じて 3 次元モデルに投影し、それを仮想カメラにおいてレンダリングすることで生成する。Outside-In カメラ映像に対応する画素値を  $\text{src}_{in}$ 、Inside-Out カメラ映像に対応する画素値を  $\text{src}_{out}$  とすると、投影するテクスチャの画素値  $\text{dst}$  は式(3)で求められる。

$$\text{dst} = k\text{src}_{out} + (1-k)\text{src}_{in} \quad 0 \leq k \leq 1 \quad (3)$$

カメラのキャリブレーション誤差や被写体形状の近似誤差により、Inside-Out カメラと Outside-In カメラから投影されるテクスチャにズレが生じるが、二つのテクスチャのブレンディングを行うことにより、違和感を軽減しつつ自然な見え方の切り替えを実現する。

## 実証実験

710cm×760cm の部屋を撮影空間として実証実験を実施した。本実験では、CPU : Intel Core i7 3.40GHz, GPU : NVIDIA GeForce GTX 550 Ti, メモリ : 8.00GB RAM を搭載したデスクトップ PC を用いて、多視点映像のキャリブレーション、3 次元モデル生成、視点遷移映像生成の処理を行った。Inside-Out カメラと Outside-In カメラには GoPro 社の HERO4 ブラックエディションを計 19 台使用した。今回の撮影では 4K での撮影を行い、4K の撮影



時の水平画角は 122.6 度で垂直画角は 94.4 度, 焦点距離は 14 mm, 画像の解像度は 4K の 3,840 画素×2,160 画素, 撮影時のフレームレートは 30fps である. SfM カメラキャリブレーションには VisualSfM[5]を用いた. 本実験のカメラ設置状況を図 8 に示す. カメラを取り付けるパネルは, 幅 71cm×高さ 56cm×厚み 5cm のものを 12 台用いた. そこに円形にパネルを 12 台設置し, 12 台の Outside-In カメラを取り付けた. また, Inside-Out カメラは 7 台用い, 円の中心に Outside-In カメラの取り付けられた高さと同様な高さになるよう, 台の上に円形に載せ, 撮影を行った. 本実験では, SfM ベースのキャリブレーションを行うため, 特徴点を多くとることで, 精度の高いキャリブレーションを行うことができる. そこで, キャリブレーション用のシーンを撮影するため, 壁や床にマーカや物体を設置し, この撮影映像を用いてキャリブレーションを行った.



図 8 実証実験の様子

図 9 に提案システムで生成した 3 次元モデルを示す. 図 10 は提案手法による実行結果である. 移動前後の撮影映像のテクスチャが, ほぼ正しい位置にマッピングされ, 視点遷移映像が生成されていることがわかる.

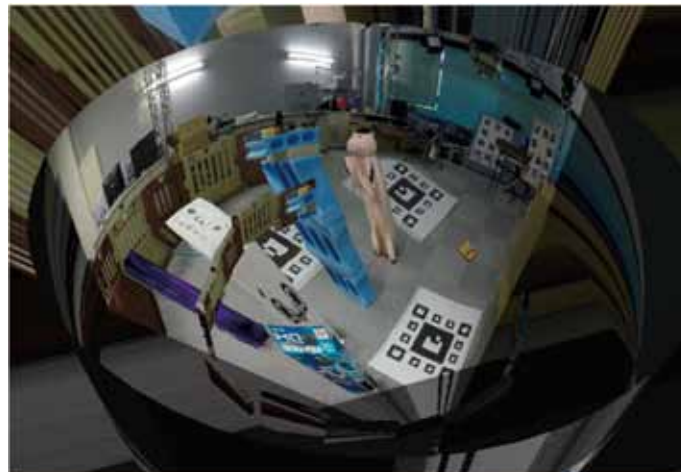


図 9 生成した 3 次元モデル



図 10 : 視点遷移映像 (上段左 Outside-In 映像から下段右 Inside-Out 映像間を視点  
が移動したような映像が生成されている)

#### 参考文献

- 【1】 Itaru Kitahara, Yuichi Ohta, “Scalable 3D Representation for 3D Video Display in a Large-scale Space,” Proc. of IEEE Virtual Reality 2003 Conference (VR2003), pp.45-52, (2003)
- 【2】 富山仁博, 岩舘祐一, “多視点ハイビジョン映像生成システムの開発,” 映像情報メディア学会誌, Vol.64, No4, pp.622-628, (2010)
- 【3】 T. Tsuda, I. Kitahara, Y. Kameda, Y. Ohta, “Smooth Video Hopping for Surveillance Cameras,” The 33rd International Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques (SIGGRAPH2006) Sketches Article No. 129, (2006)
- 【4】 C.Everitt, “Projective Texture Mapping,” White paper, Nvidia Corporation, (2011)
- 【5】 C. Wu, “VisualSFM : A Visual Structure from Motion System,” <http://ccwu.me/vsfm>, access:2016/7/11

#### 4. 教育

学生の指導状況 (学生氏名、学位の種類、論文名)

山中 一希	修士 (工学)	画像再構成処理を用いた疑似ドリーイン映像の生成手法
森下 裕介	修士 (工学)	AR 型インタラク션을を用いた物理現象の可視化
謝 淳	修士 (工学)	大規模空間の床面を対象とした Projector-Camera システムの構築

出川 諒	修士（工学）	多視点画像から復元した 3 次元モデルを用いた発破ずりの粒度分布推定手法
馬 雪詩	修士（工学）	視覚障害者の歩行支援のための指ジェスチャインターフェース
鴫 亮輔	修士（工学）	車輪の位置と車両の対称性に基づく外形復元
張 欣博	修士（工学）	サッカー選手軌跡記録からの HMD を用いた試合の VR 体験
志田 全弘	修士（工学）	注釈情報を 3 次元的に提示可能な多視点映像閲覧方式
原崎 葵	修士（工学）	フレーム補間処理を用いた非同期多視点映像の滑らかな切り換え手法
坂村 祐希	学士（工学）	全方位映像を用いた自動走行車両の疑似搭乗体験システム
永井 隆昌	学士（工学）	被写体追跡型バレットタイム映像の実時間生成・提示方式
関井 駿	学士（工学）	単眼映像を用いたバドミントン選手の位置推定手法
南雲 悠太	学士（工学）	全方位カメラを用いた経路映像からの位置推定手法

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 【受賞】

トラッキングコンペティション 2016 銅賞, 森下 裕介, 馬 雪詩, 今井 健太, 関井 駿, 志村 直樹, 日本バーチャルリアリティ学会第 21 回大会, 2016.

2016 年 9 月 14 日～16 日, つくば国際会議場

### 【外部資金】

(名称、氏名、代表・分担の別、採択年度、金額、課題名)

科学研究費補助金 基盤研究(B) 課題番号 25280056, 大田友一（研究代表者）, 亀田能成（分担者）, 北原格（分担者）, 採択 2012 年度, 2,470,000 円（2016 年度分）, 「大規模空間を対象とする人物ビルボードを用いた任意視点映像生成提示方式の高画質化」

科学技術振興機構 「持続可能な多世代共創社会のデザイン」研究開発領域「多世代共創による視覚障害者移動支援システムの開発」, 亀田能成（研究担当者）, 採択 2014 年度, 3,000,000 円（2016 年度分）



科学研究費補助金 基盤研究(A) 課題番号 15H01825, 高木 英樹 (研究代表者), 亀田 能成 (分担者), 採択 2014 年度, 800,000 円 (2016 年度分), 「体工連携によるスポーツ科学イノベーションー革新的な用具・コーチング法の開発」

科学研究費補助金 基盤研究(A) 課題番号 16H01842, 庄司 学 (研究代表者), 北原 格 (分担者), 採択 2015 年度, 650,000 円 (2016 年度分), 「強震動と液状化の複合作用を受けるライフラインネットワークの被害推定システムの開発」

科学研究費補助金 基盤研究(B) 課題番号 16H05636, 川村 洋平 (研究代表者), 北原 格 (分担者), 採択 2015 年度, 350,000 円 (2016 年度分), 「アンコール遺跡群における予防的保存に資する劣化・変形・環境観測システムの構築」

科学技術振興機構 課題番号 ACA26034, 鈴木健嗣 (研究担当者), 北原格 (分担者) 採択 2014 年度 (学内配分のため 2016 年度の分担額の明示無し), 「ソーシャル・イメージング: 創造的活動促進と社会性形成支援」

科学技術振興機構 課題番号 AHA28074, 森嶋厚行 (研究担当者), 北原格 (分担者) 採択 2016 年度 1,000,000 円 (2016 年度分), 「CyborgCrowd:柔軟でスケーラブルな人と機械の知力集約」

共同研究 (トヨタ自動車株式会社) 課題番号 SJE27004K, SJE28002, 北原格 (代表者), 2016 年度, 1,500,000 円, 「高度アクセシブル社会実現に向けた基盤研究」

受託研究 (公益財団法人日本バドミントン協会) 課題番号 APE28704, 北原格 (代表者), 2016 年度, 300,000 円, 「バドミントン競技映像の分析」

受託事業 (ヤフージャパン株式会社) 課題番号 RPE28024, 北原格 (代表者), 2016 年度, 500,000 円, 「自由視点映像のサービス化にむけた研究開発及び撮影に関する学術指導」

受託事業 (2501 株式会社) 課題番号 RPE28030, 北原格 (代表者), 2016 年度, 550,000 円, 「自由視点映像撮影・生成システムの実証実験における学術的知見・実践経験を活かした学術指導」

【知的財産権】（種別、氏名、課題名、年月日）

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

Atsuya Oikawa, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta  
“Full-Scale Visualization of a Person on a Movable Transparent Screen” ,  
Proceedings of the 15th IEEE and ACM International Symposium on Mixed  
and Augmented Reality (ISMAR2016), pp.51-52, 2016. 2016/9/19-23, Merida,  
Mexico.

Chun Xie, Yoshinari Kameda, Kenji Suzuki, and Itaru Kitahara “Large Scale  
Interactive AR Display Based on a Projector-Camera System” , 2016  
Symposium on Spatial User Interaction, pp.179, 2016. 2016/10/15-16, Tokyo,  
Japan

#### B) 査読無し論文

### (2) 国際会議発表

#### A) 招待講演

#### B) 一般講演

Naoki Shimura, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara “A Viewpoint  
Movement Representation Method Between Two Cameras Shooting at  
Different Distances” , Asia-Pacific Workshop on Mixed Reality, 2016.  
2016/4/22-24, Andong-si, Korea.

Nobuyuki Kitamura, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, “A Method to  
Switch Multiple-View Videos Using Multi-Touch Interface” , Asia-Pacific  
Workshop on Mixed Reality, 2016. 2016/4/22-24, Andong-si, Korea.

Chun Xie, Yoshinari Kameda, and Itaru Kitahara, “ Interactive  
Projection-Based AR System in a Large Scale Space” , Asia-Pacific Workshop on  
Mixed Reality, 2016. 2016/4/22-24, Andong-si, Korea.

Itaru Kitahra, Shogo Atsumi, Ryo Degawa, Yohiei Kawamura, Hyongdoo Jang, and Yuichi Ohta, “3D Model Reconstruction of Rocks on a Slope for Simulating a Rock Fall”, Sustainability and Resiliency in Geotechnical Engineering (Geo-Chicago 2016), ASCE Geotechnical Special Publication, Vol.269, pp.508-517, (DOI: 10.1061/9780784480120.052), (2016).

Atsuya Oikawa, Itaru Kitahara, Yoshinari Kameda, and Yuichi Ohta “Full-Scale Visualization of a Person on a Movable Transparent Screen” , Proceedings of the 15th IEEE and ACM International Symposium on Mixed and Augmented Reality (ISMAR2016), pp.51-52, 2016. 2016/9/19-23, Merida, Mexico.

Chun Xie, Yoshinari Kameda, Kenji Suzuki, and Itaru Kitahara “Large Scale Interactive AR Display Based on a Projector-Camera System” , 2016 Symposium on Spatial User Interaction, pp.179, 2016. 2016/10/15-16, Tokyo, Japan

Ryo Degawa, Hyongdoo Jang, Youhei Kawamura, Itaru Kitahara, Erkan Topal, and Yasunori Endo , “A Conceptual Study for Development of 3D Rock Fragmentation Analysis System with Stereo-photogrammetry Technologies”, The 9th Asian Rock Mechanics Symposium (ARMS9), 9 pages, 2016. Oct.18, Bali, Indonesia.

Kazuho Kamasaka, Yoshinari Kameda, Ryosuke Ichikari, Takeshi Kurata, and Jun Ishikawa “A Study on Finding Virtual Items by Foot Through AR Shogi Game” , 32nd CSUN Assistive Technology Conference, ENT-013, 2017. 2017/2/27-3/4, San Diego, USA.

### (3) 国内学会・研究会発表

#### A) 招待講演

#### B) その他の発表

Cesar Daniel Rojas Ferrer, Itaru Kitahara, and Yoshinari Kameda “A Prospective Study About Enhancing Effect of Vr in Soccer Training” IEICE Technical Report, MVE, vol.116, no.150, pp.25-30, 2016. 2016/7/20, The University of Tokyo, Japan.

及川 純耶, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一 “環境埋め込み型カメラの撮影空間における人物像の映像的復元”, 日本バーチャルリアリティ学会第 21 回大会論文集, 2 pages, 2016. 2016 年 9 月 14 日～16 日, つくば国際会議場

志村 直樹, 亀田 能成, 北原 格 “撮影距離の異なる 2 台のカメラ間の視点移動表現法”, 日本バーチャルリアリティ学会第 21 回大会論文集, 2 pages, 2016. 2016 年 9 月 14 日～16 日, つくば国際会議場

北村 誠之, 亀田 能成, 北原 格 “マルチタッチ入力を用いた多視点映像切り替えインタフェース”, 日本バーチャルリアリティ学会第 21 回大会論文集, 2 pages, 2016. 2016 年 9 月 14 日～16 日, つくば国際会議場

坂村 祐希, 亀田 能成, 北原 格 “自動走行車両搭乗 者のための全方位 AR 提示”, 日本バーチャルリアリティ学会複合現実感研究会, vol.19, no.2, pp.51-55, 2016. 2016 年 10 月 13 日～14 日, 北海道支笏湖

永井 隆昌, 亀田 能成, 北原 格 “実時間バレットタイム映像提示方式”, 日本バーチャルリアリティ学会複合現実感研究会, vol.19, no.2, pp.69-74, 2016. 2016 年 10 月 13 日～14 日, 北海道支笏湖

山中 一希, 亀田 能成, 北原 格, 大田 友一 “画像再構成処理を用いた疑似前後視点移動映像の生成”, 日本バーチャルリアリティ学会複合現実感研究会, vol.19, no.2, pp.75-79, 2016. 2016 年 10 月 13 日～14 日, 北海道支笏湖

馬 雪詩, 北原 格, 亀田 能成 “歩行中の手指ジェスチャ入力と音によるフィードバックの検討”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.116, no.245, pp.89-92, 2016. 2016 年 10 月 13 日～14 日, 北海道支笏湖

釜坂 一步, 北原 格, 亀田 能成 “撮影環境の異なる画像群間の類似画像検索による歩行者位置推定”, HCG シンポジウム 2016, pp.140-146, 2016. 2016 年 12 月 7 日～9 日, 高知市文化プラザカルポート

亀田 能成, 釜坂 一步, 一刈 良介, 蔵田 武志, 石川 准 “視覚障害者の移動を支援する位置提示の実証実験”, HCG シンポジウム 2016. pp.343-346, 2016, 2016 年 12 月 7 日～9 日, 高知市文化プラザカルポート

謝 淳, 亀田 能成, 北原 格 “大規模空間におけるプロカムシステムの位置合わせの自動化”, HCG シンポジウム 2016, pp.172-176, 2016. 2016 年 12 月 7 日～9 日, 高知市文化プラザカルポート

今井 健太, 北原 格, 亀田 能成 “デプスカメラと加速度センサを用いた歩行可能な平面領域の検出”, HCG シンポジウム 2016. pp.540-545, 2016, 2016 年 12 月 7 日～9 日, 高知市文化プラザカルポート

亀田 能成, 釜坂 一步, 一刈 良介, 蔵田 武志, 喜多 伸一, 石川 准 “AR 巨人将棋による視覚障害者向け移動支援検証実験”, 第 42 回感覚代行シンポジウム講演論文集, pp.31-32, 2016. 2016 年 12 月 12 日～13 日, 産業技術総合研究所臨海副都心センター

積田 貴幸, 北原 格, 高木 英樹, 亀田 能成 “競泳プール映像における色情報分布を用いた泳者領域抽出”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.116, (2), 2017. 2017 年 3 月 6 日～7 日, 九州大学大橋キャンパス

志田 全弘, 亀田 能成, 石塚 祐香, 辻 愛里, 榎本 拓哉, 山本 淳一, 鈴木 健嗣, 北原 格 “注釈情報を 3 次元的に AR 提示可能な多視点映像閲覧方式”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.116, (32), 2017. 2017 年 3 月 6 日～7 日, 九州大学大橋キャンパス

原崎 葵, 亀田 能成, 北原 格 “フレーム補間処理を用いた非同期多視点映像の滑らかな切り換え法”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.116, (33), 2017. 2017 年 3 月 6 日～7 日, 九州大学大橋キャンパス

出川 諒, 亀田 能成, 川村 洋平, Jang Hyongdoo, 北原 格 “粒度分布推定のための発破ずり 3 次元モデルの生成手法”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.116, (55), 2017. 2017 年 3 月 6 日～7 日, 九州大学大橋キャンパス

鴫 亮輔, 北原 格, 亀田 能成 “車輪の位置と車両の対称性に基づく 3 次元形状復元手法”, 電子情報通信学会 技術研究報告 MVE, vol.116, (56), 2017. 2017 年 3 月 6 日～7 日, 九州大学大橋キャンパス

#### (4) 著書、解説記事等

宍戸 英彦, 北原 格, 亀田 能成, 大田 友一 “モーショントラッキングを活用したバドミントン競技のシャトル追跡手法”, 日刊工業新聞 画像ラボ, vol.27, no.7, pp.12-19, 2016. 2016 年 7 月 1 日発行

### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

### 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

### 9. 管理・運営

亀田 能成

エンパワーメント情報学プログラム運営委員会委員

エンパワーメント情報学プログラム学生委員会委員長

北原 格

筑波大学全学共通教育計算機システム WG 委員

システム情報工学研究科広報委員長

### 10. 社会貢献・国際貢献

亀田 能成

電子情報通信学会 マルチメディア・仮想環境基礎 研究専門委員会 委員長

電子情報通信学会 サイバーワールド 時限研究専門委員会 委員

北原 格

電子情報通信学会和文論文誌 D 編集幹事

映像情報メディア学会スポーツ情報処理時限研究会 (SIP) 幹事

日本バーチャルリアリティ学会 SIG-MR 研究会幹事

## 11. その他

海外長期滞在、フィールドワークなど

2017 年 3 月 13 日～25 日 : Centre for Vision, Speech and Signal Processing, University of Surrey, Visiting Researcher (北原格)